

**Ein Modell für Stickstoff- und Kohlenstoffumsätze
im Boden von Agrarökosystemen
unter besonderer Berücksichtigung der Variabilität
der mikrobiellen Aktivität**

Von der Fakultät für Physik und Geowissenschaften
der Technischen Universität Carolo-Wilhelmina
zu Braunschweig
zur Erlangung des Grades einer
Doktorin der Naturwissenschaften
(Dr.rer.nat.)

genehmigte
D i s s e r t a t i o n

von Janina Onigkeit
aus Goslar

1. Referent: Prof. Dr. Otto Richter

2. Referent: Prof. Dr. Ralf Seppelt

eingereicht am: 18. Oktober 2004

mündliche Prüfung (Disputation) am: 15. April 2005

Druckjahr: 2006

Teilergebnisse aus dieser Arbeit wurden mit Genehmigung der Gemeinsamen Naturwissenschaftlichen Fakultät in folgenden Beiträgen vorab veröffentlicht:

Publikationen

- Onigkeit, J.: Modellierung des Stickstoff-Kreislaufes in landwirtschaftlich genutzten Böden. In: Richter, O., Söndgerath, D. & Dieckrüger, B. (Hrg.): Sonderforschungsbereich 179 „Wasser- und Stoffdynamik in Agrarökosystemen“. Abschlussbericht Band 1, 48-65, Selbstverlag, Institut für Geographie und Geoökologie der TU Braunschweig (1996).
- Bormann, H., Conrad, R., Onigkeit, J. & R. Seppelt, Modellanwendung: Simulation des Gebiets-Wasserhaushaltes für das Untersuchungsgebiet Nienwohlde sowie der Stickstoff- und Bestandesdynamik für das Untersuchungsgebiet Neuenkirchen. In: Richter, O., Söndgerath, D. & Dieckrüger, B. (Hrg.): Sonderforschungsbereich 179 „Wasser- und Stoffdynamik in Agrarökosystemen“. Abschlussbericht Band 1, 268-277, Selbstverlag, Institut für Geographie und Geoökologie der TU Braunschweig (1996).

Tagungsbeiträge

- Onigkeit, J. & Richter, O.: Modelling N-Transformations in a Soil-crop System Considering the Activity of the Microbial Biomass Population. Transactions of the 9th Nitrogen Workshop, Braunschweig, 289-292 (1996).

DANK

Zum Gelingen dieser Arbeit haben - auf den unterschiedlichsten Ebenen - eine Vielzahl von Personen beigetragen, von denen ich hier nur einige erwähnen kann:

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. Otto Richter zum Einen für die Überlassung des Themas, aber vor allem dafür, dass er eine Nicht-Mathematikerin mit seiner Begeisterung für die Modellbildung sehr nachhaltig anstecken konnte.

Weiterhin danke ich meinem ehemaligen Kollegen und jetzigen Prof. Dr. Ralf Seppelt für die Übernahme des Korreferates und die Leichtigkeit, die er in der Anfangsphase der Arbeit mit seiner mathematisch-philosophischen Weltsicht in das eher bodenständige Thema Stickstoffmodellierung einbrachte.

Der Arbeitsgruppe am Institut für Geographie und Geoökologie der TU Braunschweig und besonders meinen „Zimmergenossinnen“ Dr. Ute Schröder und Dr. Natalie von Götz bin ich dankbar für die fachlichen Diskussionen und die über „Gott und die Welt“, die das Schreiben einer Doktorarbeit immer wieder in den richtigen Zusammenhang rückten.

Mein Dank gilt auch den vielen mir bekannten, aber auch unbekannten Personen, die im Rahmen des SFB 179 die Messwerte erhoben haben, ohne die eine Modellentwicklung letztlich nicht möglich ist.

Für die kritische Durchsicht der Entwurfsfassungen der Arbeit danke ich meinen jetzigen ArbeitskollegInnen Dagmar Fuhr, Dr. Petra Döll, Dr. Rüdiger Schaldach und Dr. Jörg Priess und noch einmal Dr. Ute Schröder, die die Arbeit damit von Anfang bis zum Ende begleitet hat.

Prof. Dr. Joe Alcamo am Zentrum für Umweltsystemforschung der Universität Kassel danke ich für seine Unterstützung und vor für allem sein über sieben Jahre währendes Drängen, dieses Werk zu einem Ende zu bringen.

Ich danke Monika Golling, die mich durch alle Höhen und Tiefen begleitet hat, die eine Doktorarbeit mit sich bringt und so entscheidend dazu beigetragen hat, dass fertig wurde, was eigentlich nie fertig wird.

Meinen Freundinnen, allen voran Susanne Schermann danke ich für ihre unendliche Geduld, wenn ich die eine oder andere Verabredung wegen „der Arbeit“ absagen musste.

Schließlich und endlich bin ich der DFG zu Dank verpflichtet, die diese Arbeit im Rahmen des SFB 179 „Wasser- und Stoffdynamik in Agrarökosystemen“ an der TU Braunschweig finanziell gefördert hat.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|-----------|
| 1. EINLEITUNG..... | 1 |
| 1.1 PROBLEMSTELLUNG..... | 1 |
| 1.2 GRUNDLAGEN UND MODELLIERUNGSANSÄTZE | 2 |
| 1.3 ZIELSETZUNG | 10 |
| 2. MODELLBESCHREIBUNG | 12 |
| 2.1 ÜBERBLICK | 12 |
| 2.2 AKTIVITÄT UND WACHSTUM DER MIKROORGANISMEN IM BODEN | 15 |
| 2.2.1 <i>Konzept der mikrobiellen Aktivität und ihrer Änderung</i> | 16 |
| 2.2.1.1 Die mikrobielle Aktivität unter aeroben Bedingungen | 19 |
| 2.2.1.2 Die mikrobielle Aktivität unter anaeroben Bedingungen | 23 |
| 2.2.1.3 Kombinierte Wirkung von Witterungs- und Substrateinfluss auf die mikrobielle Aktivität | 26 |
| 2.2.2 <i>Wachstumsdynamik der Mikroorganismen</i> | 31 |
| 2.2.2.1 Populationsdynamik - Kohlenstoffanteil | 31 |
| 2.2.2.2 Populationsdynamik - Stickstoffanteil | 37 |
| 2.3 UMWANDLUNG DER ORGANISCHEN BODENSUBSTANZ..... | 40 |
| 2.3.1 <i>Umsatz der organischen C-Komponenten</i> | 41 |
| 2.3.2 <i>Umsatz der organischen N-Komponenten</i> | 45 |
| 2.4 DYNAMIK DER ANORGANISCHEN N-KOMPONENTEN..... | 46 |
| 2.4.1 <i>Nitrifikation und Denitrifikation</i> | 47 |
| 2.4.1.1 Nitrifikation | 47 |
| 2.4.1.2 Heterotrophe Denitrifikation..... | 49 |
| 2.4.1.3 Autotrophe Denitrifikation..... | 52 |
| 2.4.2 <i>Adsorption und Desorption von NH_4^+ in der Bodenmatrix</i> | 53 |
| 2.4.3 <i>Gesamtdynamik von NO_3^- und NH_4^+</i> | 53 |
| 2.5 MODELLKALIBRIERUNG..... | 55 |
| 2.5.1 <i>Vorgehensweise</i> | 55 |
| 2.5.2 <i>Steuerfunktionen für die Witterungseinflüsse</i> | 57 |
| 2.5.3 <i>Mineralisierung/Immobilisierung und mikrobielles Wachstum</i> | 61 |
| 2.5.4 <i>Heterotrophe Denitrifikation</i> | 68 |
| 2.5.5 <i>Nitrifikation</i> | 74 |
| 2.5.6 <i>Autotrophe Denitrifikation</i> | 78 |
| 3. QUALITATIVER UND QUANTITATIVER MODELLTEST..... | 81 |
| 3.1 QUALITATIVE MODELLTESTS | 82 |
| 3.1.1 <i>Langzeitverhalten des Modells</i> | 82 |
| 3.1.2 <i>Einfluss der mikrobiellen Aktivität r auf die N-Mineralisierung</i> | 83 |
| 3.1.3 <i>Stoffumsätze unter aeroben und anaeroben Bedingungen</i> | 85 |
| 3.2 QUANTITATIVE MODELLTESTS – MODELLVALIDIERUNG | 91 |
| 3.2.1 <i>Ableitung von Standardanfangswerten</i> | 92 |
| 3.2.2 <i>Immobilisierung und Remineralisierung von N_{\min} bei Strohzufuhr</i> | 95 |
| 3.2.3 <i>Modellverhalten bei Applikation von Weizenresiduen</i> | 101 |
| 3.2.3.1 Experiment 1 (Kontrollexperiment ohne Substratzugabe)..... | 102 |
| 3.2.3.2 Experiment 2 (Zugabe von Weizenstroh) | 105 |

| | | |
|-----------|--|------------|
| 3.2.3.3 | Experiment 3 (Zugabe von Weizenstoppeln und Wurzelbiomasse)..... | 111 |
| 3.2.4 | <i>Modellverhalten bei Applikation von Weizenstroh</i> | 116 |
| 3.2.4.1 | Experiment 1 (Kontrollexperiment ohne Substratzugabe)..... | 116 |
| 3.2.4.2 | Experiment 2 (Zugabe von Winterweizenstroh)..... | 121 |
| 3.3 | ZUSAMMENFASSUNG UND DISKUSSION | 126 |
| 4. | MODELLANWENDUNG UND -TEST UNTER FREILANDBEDINGUNGEN..... | 130 |
| 4.1 | EINBINDUNG VON SIMULAT-NC IN DAS ÖKOSYSTEMMODELL SIMULAT | 130 |
| 4.1.1 | <i>Das Pflanzenmodell</i> | 131 |
| 4.1.2 | <i>Wasser- und Stofftransport</i> | 132 |
| 4.1.3 | <i>Bodentemperatur</i> | 133 |
| 4.2 | BESCHREIBUNG DES UNTERSUCHUNGSSTANDORTES | 133 |
| 4.2.1 | <i>Bodeneigenschaften</i> | 134 |
| 4.2.2 | <i>Bewirtschaftung und Managementmaßnahmen</i> | 134 |
| 4.3 | SIMULATIONSEXPERIMENT | 136 |
| 4.3.1 | <i>Anfangswerte</i> | 137 |
| 4.3.2 | <i>Simulationsergebnisse</i> | 138 |
| 4.3.2.1 | Witterungsbedingungen | 139 |
| 4.3.2.2 | Pflanzenwachstum | 141 |
| 4.3.2.3 | Konzentrationsverlauf mineralischer Stickstoff..... | 143 |
| 4.3.2.4 | NO ₃ ⁻ -Verlagerung | 147 |
| 4.3.2.5 | Die mikrobielle Biomasse und ihre Aktivität | 150 |
| 4.3.2.6 | N ₂ O-Emissionen/Denitrifikation..... | 154 |
| 4.3.2.7 | Adsorption und Desorption von Ammonium..... | 156 |
| 4.3.2.8 | Mikrobielle N-Verwertung oder N-Fixierung? | 158 |
| 4.3.2.9 | Sensitivitätsanalyse | 160 |
| 4.4 | ZUSAMMENFASSUNG UND DISKUSSION | 162 |
| 5. | ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK..... | 166 |
| 6. | LITERATUR | 169 |

Verzeichnis der Modellvariablen und -parameter

| Symbol | Bedeutung | Einheit |
|---------------------|---|---|
| α | Parameter für temperaturabhängige Steuerfunktion der mikrobiellen Aktivität unter anaeroben Bedingungen | - |
| $\alpha(C_b)$ | Mikrobielle Sterberate | kg C ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ Tag ⁻¹ |
| α_{max} | Maximale mikrobielle Sterberate | Tag ⁻¹ |
| β | Parameter für temperaturabhängige Steuerfunktion der mikrobiellen Aktivität unter anaeroben Bedingungen | - |
| $\eta(C_d)$ | Abbaurrate für den labilen organischen Pool C_d | kg C ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ Tag ⁻¹ |
| $\eta C_{d_{max}}$ | Maximale Abbaurrate für den labilen organischen Pool C_d | Tag ⁻¹ |
| $\eta(C_h)$ | Abbaurrate für den stabilen organischen Pool C_h | kg C ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ Tag ⁻¹ |
| $\eta C_{h_{max}}$ | Maximale Abbaurrate für den stabilen organischen Pool C_h | Tag ⁻¹ |
| $\eta_{nit}(N_2O)$ | Autotrophe N ₂ O-Bildungsrate | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ Tag ⁻¹ |
| $\eta_{nit1}(NH_4)$ | Rate 1. Nitrifikationsschritt $NH_4^+ \rightarrow NO_2^-$ | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ Tag ⁻¹ |
| $\eta_{nit2}(NO_2)$ | Rate 2. Nitrifikationsschritt $NO_2^- \rightarrow NO_3^-$ | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ Tag ⁻¹ |
| $\eta(N_2O)$ | Rate der mikrob. N ₂ O-Verwertung unter anaeroben Bedingungen | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ Tag ⁻¹ |
| $\eta(NO_2)$ | Rate der mikrob. NO ₂ ⁻ -Verwertung unter anaeroben Bedingungen | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ Tag ⁻¹ |
| $\eta(NO_3)$ | Rate der mikrobiellen NO ₃ ⁻ -Verwertung unter anaeroben Bedingungen | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ Tag ⁻¹ |
| θ_{opt} | Optimaler relativer Bodenwassergehalt | cm ³ cm ⁻³ |
| θ_{rel} | Relativer Bodenwassergehalt | cm ³ cm ⁻³ |
| θ | Volumetrischer Bodenwassergehalt | cm ³ cm ⁻³ |
| θ_s | Sättigungswassergehalt | cm ³ cm ⁻³ |
| θ_r | Residualer Bodenwassergehalt | cm ³ cm ⁻³ |
| λ | Parameter für die Bodenwasserfunktion der mikrob. Aktivität | - |
| $\mu(C_s)$ | Mikrobielle C_s -abhängige Wachstumsrate | kg C ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ Tag ⁻¹ |
| $\mu C_{s_{max}}$ | Maximale mikrobielle Wachstumsrate auf C_s | Tag ⁻¹ |

| | | |
|---------------------|--|---|
| μ_{n1max} | Maximale Nitrifikationsrate für NH_4^+ | Tag ⁻¹ |
| μ_{n2max} | Maximale Nitrifikationsrate für NO_2^- | Tag ⁻¹ |
| $\mu(NO_3)$ | Mikrobielle Wachstumsrate auf NO_3^- | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ Tag ⁻¹ |
| $\mu(NO_2)$ | Mikrobielle Wachstumsrate auf NO_2^- | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ Tag ⁻¹ |
| $\mu(N_2O)$ | Mikrobielle Wachstumsrate auf N_2O | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ Tag ⁻¹ |
| $\mu NH4_{max}$ | Maximale Immobilisierungsrate für NH_4^+ | Tag ⁻¹ |
| $\mu NO3_{max}$ | Maximale Immobilisierungsrate für NO_3^- | Tag ⁻¹ |
| $\mu NO2_{max}$ | Maximale Immobilisierungsrate für NO_2^- | Tag ⁻¹ |
| $\mu N2O_{max}$ | Maximale Immobilisierungsrate für N_2O | Tag ⁻¹ |
| C_b | Konzentration mikrobieller Kohlenstoff | kg C ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| C_d | Konzentration labiler organischer Kohlenstoff | kg C ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| C_h | Konzentration stabiler organischer Kohlenstoff | kg C ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| CO_2 | Kohlendioxidkonzentration | kg C ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| C_s | Konzentration löslicher organischer Kohlenstoff | kg C ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| f_{Cb} | Anteil Biomasse-C an der organischen Bodensubstanz C_h | - |
| f_{Cd} | Anteil der abgestorbenen mikrob. Biomasse, der in C_d überführt wird | - |
| f_{Cs} | Gleichgewichtsanteil C_s an C_h | - |
| f_{hCs} | Anteil, der beim Abbau von C_h in den Pool C_s übergeht | - |
| $Fr(C_h)$ | Anteil des mikrobiell verfügbaren löslichen C-Substrates C_s | - |
| $Kap_{\alpha}(C_b)$ | Mikrobielle Sterberate in Abhängigkeit von der mikrobiellen Dichte | Tag ⁻¹ |
| K_{Cd} | Michaelis-Menten-Konstante für den Abbau von C_d | kg C ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| K_{Ch} | Michaelis-Menten-Konstante für den Abbau von C_h | kg C ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| k_{hum} | Maximale Humifizierungsrate des C_d -Pools | Tag ⁻¹ |
| k_{nitden} | Maximale NO_2^- -Umsatzrate bei der autotrophen Denitrifikation | Tag ⁻¹ |
| K_{N1} | Halbsättigungskonstante für 1. Nitrifikationsschritt | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| K_{N2} | Halbsättigungskonstante für 2. Nitrifikationsschritt | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |

| | | |
|-------------------|--|---|
| K_{NH4} | Michaelis-Menten-Konstante für NH_4^+ | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| K_{NO3} | Michaelis-Menten-Konstante für NO_3^- | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| K_{Cs} | Michaelis-Menten-Konstante für die C_s -Verwertung | kg C ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| K_{rCs} | Halbsättigungskonstanten der mikrobiellen Aktivität für C_s | kg C ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| K_{rN} | Halbsättigungskonstanten der mikrobiellen Aktivität für N_{min} | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| mn_{Cs} | Mikrobieller Erhaltungsumsatz auf C_s | Tag ⁻¹ |
| mn_{NO3} | Erhaltungsumsatz der Denitrifikanten auf NO_3^- | Tag ⁻¹ |
| mn_{NO2} | Erhaltungsumsatz der Denitrifikanten auf NO_2^- | Tag ⁻¹ |
| mn_{N2O} | Erhaltungsumsatz der Denitrifikanten auf N_2O | Tag ⁻¹ |
| N_2 | Konzentration molekularer Stickstoff | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| N_b | Konzentration Mikroorganismen -N | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| N_d | Konzentration labiler organischer Stickstoff | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| N_h | Konzentration stabiler organischer Stickstoff | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| NC_b | Aktuelles N/C-Verhältnis der mikrobiellen Biomasse | - |
| NC_{bmax} | Maximales N/C-Verhältnis der mikrobiellen Biomasse | - |
| NH_4^* | NH_4^+ -Grenzkonzentration | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| NH_4^+ | Konzentration gelöstes Ammonium-N | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| NH_{4s} | Konzentration in der Bodenmatrix sorbiertes Ammonium-N | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| N_{min} | Konzentration mineralischer Stickstoff - $NH_4^+ + NO_3^-$ | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| NO_3^* | NO_3^- -Grenzkonzentration | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| NO_3^- | Konzentration Nitrat-N | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| NO_2^- | Konzentration Nitrit-N | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| N_2O | Konzentration Distickstoffoxid-N | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| NO_x | Konzentration der Stickoxide NO_3^- -N, NO_2^- -N und N_2O -N | kg N ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ |
| r | Mikrobielle Aktivität unter aeroben Bedingungen | - |
| $R(\Theta_{rel})$ | Θ_{rel} -abhängige Steuerfunktion für die mikrobielle Aktivität r | - |
| $R(C_s)$ | C_s -abhängige Steuerfunktion für die mikrobielle Aktivität r | - |

| | | |
|-------------------------|--|----|
| $R(N_{min})$ | N_{min} -abhängige Steuerfunktion für die mikrobielle Aktivität r | - |
| $R(T)$ | Temperaturabhängige Steuerfunktion für die mikrobielle Aktivität r | - |
| r_{den} | Mikrobielle Aktivität unter anaeroben Bedingungen | - |
| $R_{den}(\Theta_{rel})$ | Θ_{rel} -abhängige Steuerfunktion für die mikrobielle Aktivität r_{den} | - |
| $R_{den}(C_s)$ | C_s -abhängige Steuerfunktion für die mikrobielle Aktivität r_{den} | - |
| $R_{den}(NO_x)$ | NO_x -abhängige Steuerfunktion für die mikrobielle Aktivität r_{den} | - |
| $R_{den}(T)$ | Temperaturabhängige Steuerfunktion für die mikrobielle Aktivität r_{den} | - |
| q | Anpassungsparameter der O'Neill-Funktion | - |
| T | Tagesmittelwert der Bodentemperatur in einer Bodenschicht | °C |
| T_{max} | Letaltemperatur für aerobe Mikroorganismenpopulation | °C |
| T_{max2} | Letaltemperatur für Denitrifikantenpopulation | °C |
| T_{opt} | Optimumtemperatur für mikrobielle Aktivität unter aeroben Bedingungen | °C |
| T_{opt1} | Erstes Temperaturoptimum für mikrobielle Aktivität unter anaeroben Bedingungen | °C |
| T_{opt2} | Zweites Temperaturoptimum für mikrobielle Aktivität unter anaeroben Bedingungen | °C |
| Y_{Cs} | Mikrobielle Substratnutzungseffizienz für C_s | - |
| Y_{N_2O} | Mikrobielle Substratnutzungseffizienz für N_2O | - |
| Y_{NO_2} | Mikrobielle Substratnutzungseffizienz für NO_2^- | - |
| Y_{NO_3} | Mikrobielle Substratnutzungseffizienz für NO_3^- | - |

Verzeichnis der Abbildungen

| | | |
|---------|---|----|
| Abb. 1 | Flussdiagramm des Stickstoffmoduls von SIMULAT-NC. | 14 |
| Abb. 2 | Flussdiagramm des Kohlenstoffmoduls von SIMULAT-NC..... | 15 |
| Abb. 3 | Verlauf der Steuerfunktionen für den Einfluss der Substratversorgung auf die mikrobielle Aktivität unter aeroben und anaeroben Bedingungen..... | 20 |
| Abb. 4 | Verlauf der Steuerfunktionen für die Abhängigkeit der mikrobiellen Aktivität von den Witterungsbedingungen..... | 23 |
| Abb. 5 | Konsequenzen von vier Arten der Kopplung zwischen Witterungsfunktion und mikrobieller Aktivität..... | 30 |
| Abb. 6 | Verlauf der Funktion $Fr(C_h)$ bei Variation des organischen C-Gehaltes C_h im Boden zwischen 1 % und 3 %. | 33 |
| Abb. 7 | Verlauf der Funktion $Kap_\alpha(C_b)$ für unterschiedliche Gehalte des Bodens an stabiler organischer Bodensubstanz (C_h)..... | 36 |
| Abb. 8 | Flüsse zwischen den anorganischen Stickstoffkomponenten des Modells. | 47 |
| Abb. 9 | Anpassung der Steuerfunktion für die Temperatur $R(T)$ | 59 |
| Abb. 10 | Anpassung der zusammengesetzten Temperaturfunktion $R_{den}(T)$ | 61 |
| Abb. 11 | (a) CO_2 -Emissionen und Konzentrationsverlauf der mikrobiellen Biomasse (C_b). (b) N-Mineralisierung und Konzentrationsverlauf der löslichen Kohlenstofffraktion (C_s)..... | 68 |
| Abb. 12 | (a) Verlauf der simulierten NO_3^- - und NO_2^- -Konzentration sowie (b) der N_2O - und N_2 -Konzentration | 73 |
| Abb. 13 | Summe der N-Konzentration aus NO_3^- -N, NO_2^- -N, N_2O -N und N_2 -N aus Messwerten und Simulation..... | 74 |
| Abb. 14 | Simulierte und gemessene Konzentrationsverläufe von NH_4^+ , NO_2^- und NO_3^- als Ergebnis der Parameterschätzung für das Nitrifikationsmodell. | 77 |
| Abb. 15 | Kalibrierung des Modells für die autotrophe Denitrifikation: (a) gemessene und simulierte N_2O -Flussraten, (b) gemessene NH_4^+ - und NO_3^- -Konzentration, (c) Verlauf von Temperatur und relativem Bodenwassergehalt. | 80 |
| Abb. 16 | Auswirkungen der mikrobiellen Aktivität r auf die Rate der N-Mineralisierung aus der stabilen Fraktion der organischen Bodensubstanz (N_h) bei unterschiedlicher Substratqualität. | 85 |
| Abb. 17 | Simulierter Verlauf aller stofflichen Modellvariablen (in $kg\ ha^{-1}\ 10\ cm^{-1}$) sowie der mikrobiellen Aktivität r_{den} und r (dimensionslos) unter anaeroben und unter aeroben Bedingungen. | 88 |
| Abb. 18 | (a) Gemessener und simulierter Konzentrationsverlauf für N_{min} , (b) zeitlicher Verlauf der mikrobiellen Aktivität r sowie ihrer Steuerfunktionen für das Kohlenstoff- und das Stickstoffsubstrat, (c) Konzentrationsverlauf für die mikrobielle Biomasse C_b und den | |

| | | |
|---------|---|-----|
| | löslichen organischen Kohlenstoff C_s und (d) Veränderung des mikrobiellen C/N-Verhältnisses. | 99 |
| Abb. 19 | Ergebnisse der Simulation eines Experimentes ohne Substratzugabe nach Daten von CORBEELS et al. (1999): (a) Verlauf der gemessenen und simulierten N_{min} -Konzentration, (b) Verlauf der gemessenen und simulierten kumulierten CO_2 -Emissionen. | 104 |
| Abb. 20 | Ergebnisse der Simulation eines Experimentes mit Zugabe von Weizenstroh (a) Verlauf der gemessenen und simulierten N_{min} -Konzentration, (b) Verlauf der gemessenen und simulierten kumulierten CO_2 -Emissionen; Daten von CORBEELS et al. (1999). | 108 |
| Abb. 21 | Verlauf der mikrobiellen Aktivität r und der Steuerfunktionen der mikrobiellen Aktivität $R(C_s)$ und $R(N_{min})$ für Simulation 3. | 110 |
| Abb. 22 | Verlauf der gemessenen und simulierten (a) N_{min} -Konzentration und (b) kumulierten CO_2 -Emissionen bei Zufuhr von Weizenstoppeln- und -wurzeln; Daten von CORBEELS et al. (1999). | 113 |
| Abb. 23 | Simulierte Rate der N_{min} -Bildung aus der stabilen organischen N-Fraktion N_h bei einer Applikation von Weizenstroh (Exp. 2) sowie Stoppeln und Wurzelbiomasse (Exp. 3). | 115 |
| Abb. 24 | Verlauf der gemessenen und der simulierten Konzentrationen für ein Experiment ohne Substratzugabe nach Daten von HARDEN (1998). (a) N_{min} -Konzentration, (b) kumulierte CO_2 -Emissionen, (c) Konzentrationsverlauf für mikrobiellen Stickstoff N_b und (d) Konzentrationsverlauf für mikrobiellen Kohlenstoff C_b | 120 |
| Abb. 25 | Gemessener und simulierter Verlauf von vier Zustandsvariablen für ein Laborexperiment mit Zugabe von Weizenstroh: (a) Konzentrationsverlauf für den mineralischen Stickstoff N_{min} , (b) Verlauf der kumulierten CO_2 -Emissionen, (c) Konzentrationsverlauf für den mikrobiellen Kohlenstoff C_b , (d) Konzentrationsverlauf für den mikrobiellen Stickstoff N_b ; Daten von HARDEN (1998). | 124 |
| Abb. 26 | Übereinstimmung zwischen gemessenen und simulierten N_{min} -Konzentrationen bei (a) der Verwendung von Standardwerten für Anfangswerte und Parameter (Sim1), (b) einer Neuschätzung der Anfangswerte (Sim2) und (c) einer zusätzlichen Neuschätzung einer begrenzten Anzahl von Parametern (Sim3). | 129 |
| Abb. 27 | Witterungsbedingungen am Untersuchungsstandort Neuenkirchen (NK 278) im Zeitraum Oktober 1988 bis Oktober 1989. (a) Gemessener und simulierter Wassergehalt in der Bodenschicht 10-20 cm sowie tägliche Niederschlagsmengen. (b) Simulierte Tagesmitteltemperaturen in der Bodenschicht 0-10cm und 20-30 cm. | 140 |
| Abb. 28 | Simulierte und gemessene Werte für (a) den oberirdischen Biomassezuwachs (Halm + Blatt + Ähre) eines Winterweizenbestandes in kg Trockenmasse (TM) pro Hektar, (b) die N-Akkumulation im Pflanzenbestand und (c) den N_{min} -Gehalt der Bodenschicht 0-90 cm. | 142 |
| Abb. 29 | Simulierter und gemessener Verlauf der (a) NO_3^- - und (b) NH_4^+ -Konzentration in der Bodenschicht 0-30 cm. | 146 |

| | | |
|---------|---|-----|
| Abb. 30 | Zeitlicher Verlauf (a) der Niederschlagsmengen, (b) der Nitratkonzentration in der Bodenschicht 30-60 cm, (c) der Nitratkonzentration in der Bodenschicht 60-90 cm und (d) der Nitratkonzentration in der Bodenschicht 170-200 cm..... | 149 |
| Abb. 31 | Simulierter Verlauf (a) des Eintrags an organischer Substanz über die Pflanzenwurzeln in den Boden (Rhizosphärendeposition), (b) der Konzentration an löslichem organischen Kohlenstoff C_s , (c) der mikrobiellen Aktivität r in den Bodenschichten 0-10 cm und 20-30 cm, (d) der NH_4^+ -Konzentration in der Bodenschicht 0-30 cm, (e) der Konzentration an mikrobiellem Kohlenstoff C_b und (f) der Konzentration an mikrobiellem Stickstoff N_b | 151 |
| Abb. 32 | Simulationsergebnisse für (a) die Rate der N_2O -Emissionen und (b) die Rate der N_2 -Emissionen aus der Bodenschicht 0-30 cm. | 155 |
| Abb. 33 | Simulierter Konzentrationsverlauf für sorbiertes Ammonium (NH_{4s}) in der Bodenschicht 0-30 cm. | 157 |
| Abb. 34 | (a) Verlauf der gemessenen und simulierten N_{min} -Konzentration und (b) Verlauf der simulierten Konzentration für den mikrobiellen Stickstoff N_b bei Variation der mikrobiellen Immobilisierungsrate und dem Sorptionskoeffizienten für NH_4^+ | 159 |
| Abb. 35 | Übersicht über den Verlauf aller Modellvariablen von SIMULAT-NC unter Freilandbedingungen. | 163 |

Verzeichnis der Tabellen

| | | |
|---------|---|-----|
| Tab. 1 | Überblick über die Zustandsvariablen von SIMULAT-NC. | 13 |
| Tab. 2 | Mikrobielle Biomasse als Anteil der organischen Bodensubstanz Corg in Abhängigkeit von Bewirtschaftungsform und Düngepraxis. | 37 |
| Tab. 3 | Parameterwerte der Temperaturfunktion für die aeroben Prozesse des NC-Modells. | 58 |
| Tab. 4 | Parameterwerte für die Temperaturabhängigkeit der Aktivität der Denitrifikantenpopulation. | 60 |
| Tab. 5 | Parameterwerte für die Bodenwasserfunktion (aerob und anaerob). | 61 |
| Tab. 6 | Startwerte für die Parametrisierung des Modellteils für Mineralisierung/Immobilisierung und mikrobielle Wachstumsdynamik. | 63 |
| Tab. 7 | Parameterwerte für den Modellteil Mineralisierung/Immobilisierung und mikrobielles Wachstum. | 66 |
| Tab. 8 | Modelleffizienz ME und Mittlere Fehlerquadratsumme RMSE für den Modellteil Mineralisierung/Immobilisierung und mikrobielles Wachstum. | 66 |
| Tab. 9 | Anfangswerte für die Kalibrierung des Denitrifikationsmodells. | 70 |
| Tab. 10 | Parameterwerte des Denitrifikationsmodells. | 71 |
| Tab. 11 | Modelleffizienz ME und Mittlere Fehlerquadratsumme RMSE für das Denitrifikationsmodell. | 71 |
| Tab. 12 | Anfangswerte für die Kalibrierung des Nitrifikationsmodells mit Daten von SHI & NORTON (2000). | 76 |
| Tab. 13 | Parameterwerte für das Nitrifikationsmodell. | 76 |
| Tab. 14 | Modelleffizienz ME und Mittlere Fehlerquadratsumme RMSE für das Nitrifikationsmodell. | 77 |
| Tab. 15 | Startwert und Endwert der Modellvariablen nach einer 365-tägigen aeroben Simulation ohne Substratzufuhr bei konstanten Temperatur- und Feuchtebedingungen. | 83 |
| Tab. 16 | Typische Werte sowie als „Standard“ verwendete Startwerte für die mikrobielle Biomasse und die organischen Kompartimente des Modells. | 93 |
| Tab. 17 | Anfangs- und Parameterwerte sowie Modelleffizienz für die Simulation von N-Immobilisierung und N-Remineralisierung nach Daten von BJARNASON (1987). | 98 |
| Tab. 18 | Anfangs- und Parameterwerte sowie Modelleffizienz für die Simulation der N_{\min} - und CO_2 -Konzentration in einem Boden ohne Substratzufuhr. | 103 |
| Tab. 19 | Anfangs- und Parameterwerte sowie Modelleffizienz für die Simulation der N_{\min} - und der CO_2 -Konzentration in einem Boden mit Zufuhr von Weizenstroh. | 106 |

| | | |
|---------|--|-----|
| Tab. 20 | Anfangs- und Parameterwerte sowie Modelleffizienz für die Simulation der N_{\min} - und der CO_2 -Konzentration in einem Boden mit Zufuhr von Weizenstopeln und Wurzeln..... | 112 |
| Tab. 21 | Anfangs- und Parameterwerte sowie Modelleffizienz für die Simulation der Konzentration an mineralischem N, mikrobiellem N und mikrobiellem C sowie der CO_2 -Emissionen in einem Boden ohne Substratzufuhr..... | 118 |
| Tab. 22 | Anfangs- und Parameterwerte sowie Modelleffizienz für die Simulation des Konzentrationsverlaufes an mineralischem Stickstoff (N_{\min}), mikrobiellem Stickstoff (N_b), mikrobiellem Kohlenstoff C_b sowie der CO_2 -Emissionen für einen Boden bei Zufuhr von Stroh. | 122 |
| Tab. 23 | Bodeneigenschaften des Schlages NK 278 am Untersuchungsstandort Neuenkirchen basierend auf Daten in MCVOY et al. (1995). | 134 |
| Tab. 24 | Managementmaßnahmen im Simulationszeitraum 1988/89. | 135 |
| Tab. 25 | Zusammensetzung von frischem Schweinemist sowie Mengenzuordnung zu den Modellkompartimenten..... | 136 |
| Tab. 26 | Startwerte für die mikrobiellen und organischen Modellkompartimente für das Bodenprofil 0-90 cm am Standort Neuenkirchen (NK 278) abgeleitet aus Daten von HARDEN (1998) und MCVOY et al. (1995). | 138 |
| Tab. 27 | Modelleffizienz ME für mineralischen Stickstoff N_{\min} in der Bodenschicht 0-90 cm sowie für den Pflanzen-N-Gehalt N_{pfl} | 144 |
| Tab. 28 | Modelleffizienz ME für die Nitrat- und Ammoniumkonzentration in der Bodenschicht 0-30 cm. | 146 |
| Tab. 29 | Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse als Abweichung von den simulierten Standard- N_{\min} -Konzentrationen für den 27. Februar und den 16. August 1989..... | 161 |

1. EINLEITUNG

1.1 Problemstellung

Stickstoff stellt einen der Hauptnährstoffe für die landwirtschaftliche Pflanzenproduktion dar. Die applizierten Mengen an Stickstoffdünger haben, neben Witterungsbedingungen und Bodenqualität eines Standortes, einen entscheidenden Einfluss auf die Höhe der landwirtschaftlichen Erträge. Die Entwicklung des Haber-Bosch-Verfahrens Anfang des letzten Jahrhunderts erlaubte durch die Umwandlung von chemisch stabilem Luftstickstoff (N_2) in reaktionsfähigen Ammoniak (NH_3) einen nahezu unbegrenzten Zugang zu mineralischem Stickstoffdünger. Als Folge der leichten Verfügbarkeit und der Erfahrungen von Nahrungsmittelknappheit nahmen die eingesetzten Düngermengen seit dem 2. Weltkrieg stark zu. Noch zwischen 1961 und 2001 hat sich nach Angaben der Welternährungs- und Landwirtschaftsorganisation der Vereinten Nationen (FAO) der Verbrauch an Stickstoffdünger in Deutschland verdoppelt (FAO, 2003). Die Erträge für Weizen sind im gleichen Zeitraum um den Faktor 2,7 gestiegen. Eine Versorgung der Bevölkerung mit Getreide und anderen Feldfrüchten ist in Deutschland daher seit einigen Jahrzehnten mehr als sichergestellt. Vielmehr wird durch die inzwischen etablierte Düngepraxis den Feldern weitaus mehr Stickstoff zugeführt, als dem Boden durch die Ernte der Pflanzen entzogen wird. Die flächenbezogenen N-Überschüsse liegen in Deutschland im Mittel bei $100 \text{ kg N ha}^{-1} \text{ Jahr}^{-1}$ (siehe z.B. KALK et al., 2000, oder BECKER, 1996). Da sich der verstärkte Einsatz von Stickstoffdünger weltweit zunehmend durchsetzt, um die Nahrungsmittelproduktion für eine wachsende Bevölkerung bei begrenzter Flächenverfügbarkeit sicherzustellen, werden die aus dieser Düngepraxis resultierenden Probleme in ihrer Ernsthaftigkeit inzwischen mit der Zerstörung der Ozonschicht oder dem Treibhauseffekt verglichen (KAISER, 2001).

Als negative Nebeneffekte dieser Düngepraxis sind vor allem die folgenden zwei Phänomene zu nennen:

1. *Die Kontaminierung von Grund- und Oberflächengewässern mit Nitrat (NO_3^-):* Die Verlagerung von NO_3^- in Bodenschichten unterhalb der Durchwurzelungszone des Pflanzenbestandes oder hohe Nitratkonzentrationen in Böden ohne Pflanzenbewuchs können zu schädlichen NO_3^- -Konzentrationen im Grundwasser, aber auch in Oberflächengewässern führen. Vor allem in Regionen mit intensiver landwirtschaftlicher Nutzung führen hohe N-Düngergaben oft zu einer Überschreitung der Grenzwerte für NO_3^- im Trinkwasser. Da eine Entfernung des NO_3^- aus dem Grundwasser kaum möglich ist, kann so eine Stilllegung von Trinkwasserbrunnen notwendig werden.
2. *Die Emission des Klimagases Distickstoffoxid (N_2O):* Bilden sich im Boden anaerobe Zonen bei gleichzeitiger Verfügbarkeit von NO_3^- , so sind eine Reihe von Mikroorganismenstämmen des Bodens in der Lage, NO_3^- statt Sauerstoff für die Atmung zu nut-

zen. Die dann ablaufende Reaktionskette führt unter anderem zur Bildung von N_2O , das ein sehr viel klimawirksames Gas darstellt als beispielsweise CO_2 . Auch N_2O -Emissionen aus dem Grundwasser stellen als Folge der NO_3^- -Kontamination eine wichtige N_2O -Quelle dar. Sie könnte von der gleichen Größenordnung sein wie die direkten N_2O -Flüsse aus dem Boden (YOH et al., 1997) und wird inzwischen als so wichtig erachtet, dass sie bei den nationalen Emissionsinventaren für Treibhausgase berücksichtigt wird (siehe MOSIER et al., 1998).

Diese Auswirkungen der landwirtschaftlichen Düngepraxis bewogen den Gesetzgeber in der Düngeverordnung von 1996 Kriterien für eine gute Düngepraxis festzulegen. So sind nach Düngeverordnung § 2 „...Düngemittel (...) im Rahmen guter fachlicher Praxis zeitlich und mengenmäßig so auszubringen, dass

1. die Nährstoffe von den Pflanzen weitestgehend ausgenutzt werden können und damit
2. Nährstoffverluste bei der Bewirtschaftung sowie damit verbundene Einträge in die Gewässer weitestgehend vermieden werden.“

Und nach Düngeverordnung § 4 sind „Die im Boden verfügbaren Nährstoffmengen (...) vom Betrieb zu ermitteln

- aa) durch Übernahme der Ergebnisse der Untersuchungen vergleichbarer Standorte, oder
- bb) durch Anwendung von Berechnungs- und Schätzverfahren, die auf fachspezifischen Erkenntnissen beruhen. ...“

Damit eröffnet die Düngeverordnung eine potenzielle Einsatzmöglichkeit für mathematische Modelle, die in der Lage sind, Stickstoffumsätze in Agrarökosystemen zu quantifizieren. Die Durchführung von Simulationsexperimenten könnte bei Verwendung eines gut validierten Modells den experimentellen Aufwand bei der Abschätzung des N-Status eines Ackerbodens nicht völlig verhindern, aber zumindest stark verringern.

1.2 Grundlagen und Modellierungsansätze

Bei der Entwicklung eines Stickstoffmodells für die Quantifizierung der N-Umsätze im Ackerboden sollten nach dem aktuellen Stand der Forschung die folgenden Prozesse berücksichtigt werden:

1. Die Wachstumsdynamik und Aktivität der Mikroorganismen im Boden,
2. die Mineralisierung der organischen Substanz des Bodens,
3. die Immobilisierung der mineralischen N-Verbindungen,
4. die Nitrifikation,
5. die Denitrifikation sowie
6. die Ad- und Desorption von Ammonium (NH_4^+) an der mineralischen Bodensubstanz.

Im folgenden Kapitel werden diese Prozesse sowie einige grundlegende Modellierungsansätze beschrieben.

Wachstumsdynamik der Mikroorganismen im Boden

Die Masse der Mikroorganismen des Ackerbodens, d.h. der Pilze, Bakterien, Algen und Protozoen, macht über 80 % der Masse der Gesamtlebewesen des Bodens aus (GISI, 1990). Ihre Populationsgröße und Aktivität stellt die entscheidende Triebkraft dar für die Umwandlung der organischen Bodensubstanz und damit einhergehend die Nährstoffverfügbarkeit für den Pflanzenbestand (FRIEDEL et al., 1996). Insbesondere bei der Mineralisierung und Immobilisierung der wasserlöslichen Stickstoffverbindungen aus der bzw. in die organische Bodensubstanz spielt die Wachstumsdynamik der Mikroorganismenpopulation des Bodens eine wichtige Rolle.

Schon 1798 wurde von T. R. Malthus ein Ansatz für die Quantifizierung der zeitlichen Veränderung einer mikrobiellen Populationsdichte P formuliert (MALTHUS, 1798):

$$\frac{dP}{dt} = (\mu - \alpha) \cdot P = \tau \cdot P \quad (1)$$

Hierbei sind die spezifische Wachstumsrate μ und die Sterberate α zur wirksamen Wachstumsrate τ zusammengefasst und die Geschwindigkeit des Netto-Wachstums ist nur von der Populationsdichte P selbst abhängig (Kinetik 1. Ordnung).

Dieser Ansatz wurde weiterentwickelt, indem eine begrenzende Kapazität K ("carrying capacity") des betrachteten Habitats eingeführt wurde. Die Netto-Wachstumsrate einer Population P geht bei dieser Formulierung gegen null, sobald sich ihre Dichte einer konstanten Grenz-dichte K annähert:

$$\frac{dP}{dt} = \tau \cdot \left(1 - \frac{P}{K}\right) \cdot P \quad (2)$$

Der Nachteil dieses sogenannten logistischen Wachstumsmodells nach VERHULST (1838) besteht darin, dass es sich bei der wachstumslimitierenden Kapazität K um eine als konstant angenommene Größe handelt, die für jedes untersuchte System durch Messungen neu ermittelt werden muss.

Einen Schritt weiter ist Monod (MONOD, 1942 und 1949) gegangen, indem er den empirischen Nachweis erbrachte, dass die spezifische Wachstumsrate μ einer Mikroorganismenpopulation in Abhängigkeit von der Verfügbarkeit eines limitierenden Substrates S formuliert werden kann:

$$\mu(S) = \frac{\mu S_{\max} \cdot S}{K_S + S} \quad (3)$$

Mit:

| | | |
|------------------|--|---|
| S : | limitierende Substratkonzentration | $[\text{kg ha}^{-1} \text{ } 10 \text{ cm}^{-1}]$ |
| $\mu(S)$: | spezifische Wachstumsrate auf S | $[\text{Tag}^{-1}]$ |
| μS_{\max} : | maximale spezifische Wachstumsrate auf S | $[\text{Tag}^{-1}]$ |
| K_S : | Affinität zum limitierenden Substrat S | $[\text{kg ha}^{-1} \text{ } 10 \text{ cm}^{-1}]$ |

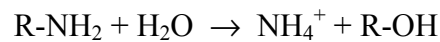
Mit diesem Schritt war es erstmals möglich, das Wachstum einer Mikroorganismenpopulation als Folge wechselnder Umweltbedingungen, hier über die Substratkonzentration, zu berechnen und damit gezielt zu steuern. Diese Beziehung wird vielfach in der industriellen Biotechnologie für die Biomasseproduktion definierter Mikroorganismenkulturen in kontinuierlicher Kultur (Chemostat) verwendet. Zunehmend wird sie auch für die Simulation des Mikroorganismenwachstums im Boden eingesetzt (siehe z.B. PANIKOV, 1995).

Stickstoffmineralisierung und -immobilisierung

Unter Mineralisierung wird im allgemeinen der mikrobielle Abbau der organischen Bodensubstanz bis in ihre anorganischen Komponenten CO_2 und H_2O verstanden. Im Zuge dieses Abbaus werden auch die in der organischen Substanz enthaltenen Nährstoffe, wie z.B. Stickstoff, Phosphor und Schwefel in anorganische, meist gut wasserlösliche Verbindungen überführt. Die Mineralisierungstätigkeit der Bodenorganismen sorgt damit für die kontinuierliche Nachlieferung von pflanzlich und mikrobiell direkt verwertbarem Stickstoff aus der organischen Bodensubstanz. Mitteleuropäische Ackerböden enthalten organisch gebundenen Kohlenstoff in der Größenordnung von 0,5 bis 3,5 % (ANDERSON & DOMSCH, 1989), der N-Anteil liegt etwa um den Faktor 10 niedriger. Die obersten 30 cm eines Ackerbodens können somit bei einem organischen Kohlenstoffgehalt von 1,5 % etwa 6000 kg Stickstoff pro Hektar enthalten. Damit ist der organisch gebundene Stickstoff die mengenmäßig wichtigste Stickstofffraktion im Boden.

In Bezug auf die Quantifizierung der mineralisierbaren N-Mengen besteht die Herausforderung darin, der Heterogenität der chemischen Bindungen innerhalb der organischen Bodensubstanz gerecht zu werden. Je stabiler diese Bindungen, desto langsamer verläuft die Mineralisierung. Eine Unterteilung der organischen Substanz erfolgt in Modellen daher oft nach ihren Umsatzzeiten. Besonders häufig findet sich dabei eine Dreiteilung der organischen Substanz in einen aktiven, einen intermediären und einen passiven Pool. Die zu den jeweiligen Pools gehörigen Umsatzzeiten belaufen sich auf einige Monate bis zu einem Jahr, mehrere Jahre bis zu einem Jahrzehnt bzw. bis zu Jahrhunderten im Fall des passiven Pools.

Von den Mikroorganismen des Bodens wird Ammonium vor allem aus den proteinartigen N-Anteilen der organischen Bodensubstanz (R-NH_2) durch enzymatische Hydrolyse freigesetzt:



Dieses Ammonium steht in der Bodenlösung als Nährstoff sowohl für die Mikroorganismen als auch den Pflanzenbestand zur Verfügung. Die nachfolgende mikrobielle, aber auch die pflanzliche Verwertung von NH_4^+ wird als Immobilisierung bezeichnet.

Beide Prozesse, d.h. sowohl die N-Mineralisierung als auch die Immobilisierung, sind in hohem Maße an die Aktivität und die Wachstumsdynamik der Mikroorganismenpopulation des Bodens gebunden. Das Wachstum und nachfolgende Absterben dieser Mikroorganismen überführt den mineralischen Stickstoff wieder in die organische Substanz des Bodens. Je kürzer also die Generationszeit einer Mikroorganismenpopulation im Boden ist, desto schneller geht die Überführung des mineralischen wasserlöslichen Stickstoffes in die organische Substanz vonstatten. Die Mikroorganismenpopulation ist somit die treibende Kraft der Stickstoff- und der Kohlenstofftransformationen in einem Ackerboden.

Nitrifikation

Die Nitrifikation wird nach einem Vorschlag der Soil Science Society of America (1987) als biologische Oxidation von Ammonium zu Nitrit oder Nitrat oder eine biologisch induzierte Erhöhung des Oxidationszustandes von Stickstoff definiert (zitiert in BREMNER, 1997). Sie spielt eine wichtige Rolle im Stickstoffkreislauf des Agrarbodens, da über diesen Prozess das mikrobiell immobilisierbare oder in der Bodenmatrix fixierbare NH_4^+ in das sehr gut wasserlösliche Nitrat (NO_3^-) umgewandelt wird. Fehlt, wie es z.B. in den Herbst- und Wintermonaten oft der Fall ist, die Vegetation als Nitratsenke, birgt die Mineralisierungs- und Nitrifikationsfähigkeit der Mikroorganismen die Gefahr der Nitratauswaschung in tiefere Bodenschichten und damit der nachhaltigen Grundwasserverunreinigung.

Die Nitrifikation verläuft in zwei Schritten und dient vorwiegend zwei Gattungen chemoautotropher Mikroorganismen zur Energiegewinnung. Im ersten Schritt oxidieren Nitrosomonas Spezies, wie z.B. *Nitrosomonas europaea*, Ammonium unter Sauerstoffverbrauch und Energiegewinn zu Nitrit (NO_2^-):



Da bei diesem Prozess Protonen (H^+) freigesetzt werden, kann starke Nitrifikationsfähigkeit zu einer lokalen Absenkung des pH-Wertes in der Bodenlösung führen.

Im zweiten Schritt wird Nitrit hauptsächlich durch Spezies der Gattung Nitrobacter (z.B. *Nitrobacter winogradskyi*) unter weiterem Sauerstoffverbrauch zum Endprodukt der Nitrifikation, dem Nitrat, oxidiert:



Dieser zweite Schritt verläuft unter aeroben Bedingungen und in ungedüngten Böden sehr viel schneller ab als die Oxidation von NH_4^+ zu NO_2^- . So ist in der Regel keine Akkumulation von NO_2^- zu beobachten. Wird jedoch Dünger verabreicht, der bei der Hydrolyse basisch reagiert (z.B. Harnstofflösungen oder harnstoffhaltige Wirtschaftsdünger), werden nach VAN CLEEMPUT (1998) durchaus höhere Nitritkonzentrationen beobachtet.

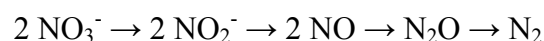
Für eine vollständige Nitrifikation, d.h. für den Ablauf beider Stufen des Prozesses, sind nach FOCHT & VERSTRATE (1977), GISI (1990) und BECK (1979) die Bedingungen optimal, wenn:

- die NH_4^+ -Konzentration im Boden hoch ist,
- der Sauerstoffgehalt des Bodens hoch ist,
- der pH-Wert des Bodens neutral bis schwach alkalisch ist,
- der Wassergehalt des Bodens mittelhoch ist,
- die Bodentemperatur zwischen 25°C und 35°C liegt,
- die Nitritakkumulation nicht zu stark ist und
- die Nitratkonzentration nicht zu stark ansteigt (Nitrobacter wird bei zu hoher NO_3^- -Konzentration gehemmt).

Die Produkthemmung durch NO_3^- spielt allerdings in offenen und heterogenen Systemen, wie es Ackerböden darstellen, nach BECK (1979) nur eine untergeordnete Rolle, da NO_3^- dem Boden durch Verlagerung mit dem Bodenwasser und NO_3^- -Aufnahme der Pflanzen laufend entzogen wird.

Denitrifikation und Nitrifikation als Ursache gasförmiger N-Verluste aus dem Boden

Laut BREMNER (1997) wird die Denitrifikation in der Mikrobiologie als respiratorische bakterielle Reduktion von Nitrat oder Nitrit zu gasförmigem Stickstoffmonoxid (NO), N_2O oder elementarem Stickstoff (N_2) definiert. Das heißt, bei unzureichender Sauerstoffzufuhr können Stickstoffoxide den Sauerstoff als Elektronenakzeptor in der Atmungskette vieler, meist heterotropher Bakterien ersetzen. Beginnend mit dem Nitratstickstoff der Oxidationsstufe +V werden die Stickoxide schrittweise bis zum molekularen Stickstoff der Oxidationsstufe 0 reduziert (PAYNE, 1973, oder KOIKE & HATTORI, 1975a,b):



Besonders die N_2O -Emissionen spielen in zweierlei Hinsicht eine negative Rolle: (1) N_2O trägt über sein stratosphärisches Abbauprodukt Stickstoffmonoxid (NO) zur Zerstörung der Ozonschicht bei (BLIEFERT, 1994) und ist (2) bei einem Zeithorizont von 100 Jahren ein um den Faktor 296 stärkeres Treibhausgas als CO_2 (ALBRITTON & MEIRA FILHO, 2001). Hauptsächlich bedingt durch den weltweit zunehmenden Einsatz von mineralischem Stickstoffdünger, verbunden mit einer langen atmosphärischen Lebenszeit von etwa 120 Jahren, hat die atmosphärische N_2O Konzentration im Zeitraum 1980 bis 1998 um 0,2 bis 0,3 % pro

Jahr zugenommen (PRATHER et al., 2001).

Die Höhe der N_2O -Emissionen aus landwirtschaftlichen Böden hängt von einer Vielzahl biologischer, chemischer und physikalischer Faktoren ab. Nach GISI (1990), NIEDER et al. (1989) und KNOWLES (1981) wird die Emissionsrate bei Vorhandensein einer Denitrifikantenpopulation umso höher,

- je geringer die Verfügbarkeit von Sauerstoff im Porenraum des Bodens ist,
- je höher die Konzentration an Stickstoffoxiden und hier insbesondere die NO_3^- -Konzentration in der Bodenlösung ist,
- je höher die Konzentration an mikrobiell leicht verfügbarem organischen Substrat ist,
- je höher die Bodentemperatur ist und
- je näher der pH-Wert des Bodens am neutralen Wert (pH 7) liegt.

Eine der Grundvoraussetzungen für den Ablauf der Denitrifikation ist das Vorhandensein anaerober Zonen im Boden. Diese können in Ackerböden hauptsächlich unter zwei Bedingungen auftreten:

1. Wenn die Bodenporen durch eine Kombination aus starken Niederschlägen und vermindertem Wasserabfluss, oder herabgesetzter Verdunstung annähernd oder vollständig geflutet werden und
2. wenn stark sauerstoffzehrende Prozesse, wie sie z.B. nach Düngergaben auftreten können, mit so hohen Raten ablaufen, dass sie die Nachlieferungsrate von Sauerstoff übersteigen. Dies kann zu meist kleinräumigen und kurzfristig auftretenden Bereichen mit verminderter Sauerstoffversorgung führen.

Für den unter (2) aufgeführten Fall wird die starke Stoffwechseltätigkeit von Pflanzenwurzeln und Mikroorganismen als Grund für eine reduzierte Sauerstoffverfügbarkeit angenommen. Insbesondere die starke Nitrifikationstätigkeit nach Zufuhr von NH_4^+ -haltigem Dünger kann, unabhängig vom Bodenwassergehalt, zu anaeroben Zonen im Boden führen und es kann zur Bildung und Emission größerer N_2O -Mengen kommen (MAAG & VINTHER, 1996; STEVENS et al., 1997; WOLF & RUSSOW, 2000). Auch DAVIDSON et al. (2000) und PARTON et al. (1996) finden eher einen Zusammenhang zwischen der Höhe der N_2O -Emissionen und den Respirations- und Nitrifikationsraten eines Bodens als dessen NH_4^+ - oder NO_3^- -Konzentration. Nach WRAGE et al. (2001) können autotrophe Nitrifizierer durch die Reduktion von NO_2^- für bis zu 30 % des jährlich emittierten N_2O verantwortlich sein. Die im Verlauf der Nitrifikation gebildeten N_2O -Mengen sollten daher bei der Abschätzung der Höhe der jährlichen N_2O -Emissionen einer landwirtschaftlich genutzten Fläche nicht vernachlässigt werden.

Adsorption und Desorption von Ammonium in der Bodenmatrix

Die mineralische Substanz des Bodens kann durch ihre Fähigkeit, Ammonium reversibel zu binden, einen wichtigen dynamischen Speicher für mineralischen Stickstoff darstellen. Nach SOON (1998) sind bis zu 10 % des Gesamtstickstoffgehaltes in der Bodenschicht von 0 bis 100 cm als sogenanntes „nicht-austauschbares“ oder fixiertes Ammonium-N¹ gebunden. SMITH et al. (1994) fanden in den obersten 20 cm von zehn untersuchten Böden einen fixierten N-Anteil zwischen 5 % und 45 %, der in den Unterböden sogar noch höher lag. Insbesondere die durch den N-Bedarf der Pflanzen, aber auch den mikrobiellen N-Bedarf verursachte Entleerung des Tonmineralspeichers kann nach NIEDER et al. (1995a, b) eine wichtige Rolle bei der Dynamik des mineralischen Stickstoffs im Boden spielen.

Einfluss des Pflanzenbestandes auf Kohlenstoff- und Stickstoffflüsse im Boden

Der typische einjährige Pflanzenbestand eines Agrarökosystems sorgt durch die Festlegung von CO₂ in der Pflanzenbiomasse für die Zufuhr frischer organischer Substanz im Boden. Dies geschieht auf dreierlei Weise:

1. als kontinuierliche Zufuhr von absterbendem ober- und unterirdischem Pflanzenmaterial während der Vegetationsperiode,
2. als einmalige Zufuhr durch die Beerntung, wenn dem Boden, in Abhängigkeit von der Bewirtschaftungsart, größere Mengen an Ernteresiduen sowie die Gesamtheit der Wurzelbiomasse als organisches Material zugeführt werden, sowie
3. als kontinuierliche Zufuhr schnell verwertbarer organischer Substanz während der Vegetationsperiode durch Wurzelausscheidungen in den Boden.

Die mikrobiellen Kohlenstoff- und Stickstoffumsätze im Boden werden durch die Pflanzen auf zweierlei Weise beeinflusst: Zum Einen können sie durch den Nährstoffentzug aus der Bodenlösung einen Mangel an Nährstoffen verursachen. Dies kann dazu führen, dass zwar ausreichend organische Kohlenstoffverbindungen zur Verfügung stehen, dass aber aufgrund des Nährstoffmangels die Aktivität der Mikroorganismen des Bodens und damit auch ihre Mineralisierungs- und Immobilisierungstätigkeit gehemmt wird. Auf der anderen Seite können Pflanzen durch Ausscheidung schnell verwertbarer organischer Substanzen über die Wurzeln die mikrobielle Aktivität anregen. So fanden beispielsweise CHENG & COLEMAN (1990) in durchwurzelter Böden eine stärkere Mineralisierung von Roggenstroh als in Böden ohne Pflanzenbewuchs. Sie führen dies auf eine durch die Wurzelausscheidungen verstärkte mikrobielle Aktivität zurück. Die kontinuierlichen Wurzeleinträge während der Vegetationsperiode sind nach SWINNEN et al. (1990) ein wichtigerer Faktor in Bezug auf die Wachstumsdynamik der mikrobiellen Biomasse und der damit verbundenen Mineralisierungs- und Immobilisierungsflüsse, als der nicht unbeträchtliche Eintrag organischer Substanz nach der Ernte. So können sich die jährlichen Kohlenstoffeinträge über die Wurzeln in Ackerböden in der Größenordnung zwischen 900 und 3000 kg C ha⁻¹ bewegen. Der Anteil an der vom Pflan-

¹ Nicht-austauschbares NH₄⁺ ist definiert als der NH₄⁺-Anteil im Boden, der nicht mit einer 1 molaren Kaliumsalzlösung extrahierbar ist.

zenbestand insgesamt assimilierten Kohlenstoffmenge, der über die Wurzel ausgeschieden wird, variiert dabei zwischen 16 und 33 % (VAN VEEN et al., 1989). Trotz der kontinuierlichen Zufuhr ausreichender Mengen an C-Substrat für die Mikroorganismenpopulation der Rhizosphäre, kann allerdings gleichzeitig ein Mangel an mineralischen Nährstoffen, wie z.B. Stickstoff, nach Untersuchungen von MERCKX et al. (1987), durchaus zu einer Wachstums-limitierung der Mikroorganismen führen. Damit ist bei der Quantifizierung der Stoffumsätze im Boden nicht nur die Zufuhr organischer Substanz durch die Pflanzen zu berücksichtigen, sondern das komplexe Wechselspiel zwischen wachstumsfördernden und wachstumslimitierenden Situationen.

Modellierungsansätze

Simulationsmodelle für die Quantifizierung von Stickstoff- und Kohlenstoffumsätzen im Boden wurden bereits für die unterschiedlichsten Fragestellungen und damit zeitlichen und räumlichen Skalen entwickelt. Diese Modelle lassen sich nach PARTON et al. (1996) in drei Gruppen unterteilen:

1. Mikrobielle Wachstumsmodelle, in denen Wachstum und Aktivität der Mikroorganismenpopulation des Bodens als treibende Kraft der interessierenden Umwandlungsprozesse im Mittelpunkt stehen. In diesen Modellen werden nicht nur die wachstumsbedingten Stoffflüsse der mikrobiellen Biomasse betrachtet, sondern in der Regel auch das Absterben sowie der Stoffverbrauch durch Erhaltungsaerobic explizit modelliert. Diese Modelle werden oft mit dem Ziel entwickelt, bei der Klärung von Phänomenen der mikrobiellen Physiologie zu helfen, die bislang nicht vollständig verstanden werden und die messtechnisch nur schwer oder gar nicht zugänglich sind. In dieser Situation können Modelle wertvolle Hinweise liefern, ob oder welche Hypothesen bezüglich Details der Physiologie und damit der Stoffumsätze der Mikroorganismen im Boden plausibel sind. Das mikrobielle Wachstum wird in diesen Modellen in der Regel über Monod'sche Kinetiken formuliert (s.o.). Weitere Umweltbedingungen wie Temperatur und Bodenwassergehalt werden oft als konstant angenommen, d.h. werden in diesen Modellen nicht berücksichtigt, da die Modelle mit Hilfe von im Labor gewonnenen Daten kalibriert und getestet werden. Beispiele für diese Art von Modell sind das „N-Mineralization-Immobilization-Modell“ von VAN VEEN et al. (1984) oder das Modell NiCa, wie es in BLAGODATSKY & RICHTER, (1998) beschrieben ist.
2. Vereinfachte Prozessmodelle, in denen angenommen wird, dass sich die Prozesse der C- und N-Transformationen über diejenigen Funktionen von Bodenwassergehalt, Temperatur und pH-Wert abbilden lassen, die die mikrobielle Aktivität kontrollieren. Über das reine Netto-Wachstum hinausgehende physiologische Prozesse der Mikroorganismenpopulation, wie z.B. die Erhaltungsaerobic, bleiben hier unberücksichtigt. N-Modelle dieser Art werden für Simulationen im Feldmaßstab eingesetzt, wo in der Regel sowohl die Anzahl der gemessenen Bodenparameter sowie die zeitliche Auflösung geringer ist als bei den komplexeren und mehr prozessorientierten mikrobiellen Wachstumsmodellen. Ein weiterer Unterschied besteht darin,

dass diese Art von vereinfachten Prozessmodellen in der Regel eingebunden sind in komplexere Modellsysteme, die neben den reinen Stoffumsätzen im Boden das Pflanzenwachstum und bodenphysikalische Prozesse wie Änderungen von Temperatur und Wassergehalt des Bodens berechnen. Die reine Anzahl der abgebildeten Prozesse geht damit meistens weit über die hinaus, die die unter (1) beschriebenen Modelle berücksichtigen. Beispiele für diese Art von Modell sind z.B. das Stoffhaushaltsmodell ANIMO (RIJTEMA & KROES, 1991) oder das Modell CENTURY (z.B. PARTON et al., 1993; PARTON, 1996). CENTURY, das eine zeitliche Auflösung von einem Monat aufweist, ist konzipiert, um langfristige Dynamiken (Dekaden bis Jahrhunderte) der organischen Bodensubstanz zu simulieren. Die Umsatzraten für die verschiedenen Stoffkompartimente des Bodens werden in diesen Modellen meist vereinfacht über Kinetiken 1. Ordnung modelliert.

3. Bodenstrukturmodelle („soil structural models“), mit deren Hilfe bodenphysikalische Teilprozesse, wie z.B. die Diffusion von Substraten und Gasen in und aus Bodenaggregaten mit sehr hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung abgebildet werden. Diese Art von Modellen wird eher zu Forschungszwecken entwickelt, um experimentell schwer zugängliche Fragestellungen zu behandeln. Hier geht es z.B. um die quantitative Abschätzung der Geschwindigkeit der Sauerstoffdiffusion bei der Denitrifikation (z.B. ARAH, 1988) oder auch um das Verständnis der Zusammenhänge zwischen den Transportprozessen in Bodenaggregaten und dem mikrobiellen Wachstum (vgl. NIETFELD et al., 1992).

1.3 Zielsetzung

Das Ziel dieser Arbeit bestand darin, ein Modell zu entwickeln, das in der Lage ist, insbesondere die Konzentrationsverläufe von mineralischen Stickstoffverbindungen in Ackerböden in Abhängigkeit von wechselnden biophysikalischen Umweltbedingungen und Managementmaßnahmen nachzubilden. Das Modell sollte in der Lage sein, sowohl die kurzfristige, d.h. Tage bis Wochen umfassende, als auch die über Monate bis Jahre ablaufende Dynamik von Stickstoffverbindungen eines Agrarökosystems unter Freilandbedingungen abzubilden. Im Zentrum des Modells sollte dabei die Beschreibung der Dynamik der Mikroorganismenpopulation des Bodens stehen.

Die Arbeitsschritte bei der Entwicklung des Modells umfassten im Einzelnen:

- Die Identifikation der relevanten Prozesse und Substanzen, die an Stickstoffumsätzen im Boden beteiligt sind,
- die Entwicklung der Modellgleichungen für diese Prozesse,
- die Parametrisierung der Teilprozesse des Modells,
- die Validierung des Modells mit Hilfe von Daten aus Laborexperimenten,
- die Integration des Modells in das Ökosystemmodell SIMULAT sowie
- eine Validierung des integrierten Modells SIMULAT-NC unter Verwendung von Daten aus Freilandexperimenten.

Als Ausgangspunkt bei der Modellentwicklung diente eine Vorläuferversion des Modells NiCa (BLAGODATSKY & RICHTER, 1998), dessen Modellgleichungen Herr S. Blagodatsky freundlicherweise zur Verfügung stellte. NiCa beschreibt mikrobielles Wachstum im Boden sowie die damit verbundenen N-Umsätze. Es ist für die Simulation von Laborexperimenten entwickelt worden, um Fragestellungen der kurzfristigen mikrobiellen Wachstumsdynamik und der daran beteiligten Stoffflüsse im Boden zu behandeln. Dieses Modell wurde in Teilen vereinfacht und verändert sowie um eine Reihe von Prozessen und Stoffkompartimenten erweitert, um es für Simulationsexperimente mit längerem Zeithorizont und unter typischen landwirtschaftlichen Managementbedingungen einsetzen zu können.

Das in das Ökosystemmodell SIMULAT integrierte Modell SIMULAT-NC sollte abschließend dazu genutzt werden, eine bisher nicht geklärte Fragestellung zu untersuchen: So wird während der Vegetationsperiode oft beobachtet, dass bei N_{\min} -Messungen wenige Tage nach der Applikation größerer Mengen mineralischen Stickstoffs ein Großteil dieses Stickstoffs weder in der Bodenlösung noch in der Pflanze nachweisbar ist. Existierende Modelle sind bisher nicht in der Lage, dieses Phänomen adäquat nachzuvollziehen (siehe z.B. WHITMORE, 1995; DE WILLIGEN, 1991). Für diese Beobachtung werden in der Literatur zwei Erklärungsansätze angeboten: (1) eine schnelle mikrobielle N-Immobilisierung (KERSEBAUM, 1989; NIEDER et al., 1995a) sowie (2) eine Fixierung von NH_4^+ in den Tonmineralen des Bodens (WHITMORE et al., 1991). Durch Berücksichtigung beider Prozesse im Modell sollte es möglich sein, die Frage nach dem kurzfristigen Verbleib des Düngerstickstoffs zu untersuchen.

2. MODELLBESCHREIBUNG

In diesem Kapitel werden die Modellgleichungen des Stickstoff- und des Kohlenstoffmodells sowie die Annahmen, die diesen Gleichungen zugrunde liegen, ausführlich beschrieben. Einem kurzen Modellüberblick in Kapitel 2.1 folgt die Beschreibung der Modellansätze für Aktivität und Wachstum der mikrobiellen Biomasse in Kapitel 2.2. In den beiden folgenden Kapiteln werden die Modellgleichungen für die Mineralisierung und Immobilisierung von Kohlenstoff und Stickstoff aus der organischen Substanz (Kapitel 2.3) und schließlich der Modellteil für die Nitrifikation und die Denitrifikation dargestellt (Kapitel 2.4). Auch die Modellkalibrierung und ihre Ergebnisse, d.h. die Werte der Modellparameter sind in diesem Kapitel zu finden (Kapitel 2.5).

2.1 Überblick

Mit der vorliegenden Arbeit wird das prozessorientierte Modell SIMULAT-NC vorgestellt, das mit dem Ziel entwickelt wurde, die zeitliche und räumliche Dynamik der Stickstoff- und Kohlenstoffkonzentrationen in mitteleuropäischen Ackerböden zu quantifizieren. Modelleingangsgroßen, wie die Bodentemperatur, der Bodenwassergehalt und durch das Pflanzenwachstum induzierte Stoffflüsse, werden durch das modular aufgebaute Standortmodell SIMULAT bereitgestellt. Eine kurze Beschreibung von SIMULAT und der Kopplung des NC-Modells an die SIMULAT-Teilmodelle, die das Pflanzenwachstum und die bodenphysikalischen Prozesse wie Wasser- und Stofftransport beschreiben, erfolgt in Kapitel 4, in dem die Modellanwendung unter Freilandbedingungen beschrieben wird. Auf die Stoffflüsse zwischen SIMULAT-NC und dem SIMULAT-Pflanzenmodell wird schon in der folgenden Beschreibung der Modellgleichungen eingegangen.

SIMULAT-NC beschreibt die zeitliche Dynamik von 16 Zustandsvariablen des Stickstoff- und Kohlenstoffkreislaufes über ein System gekoppelter gewöhnlicher Differentialgleichungen. Die Variablen des Modells sind, nach Stickstoff- und Kohlenstoffkomponenten getrennt, in Tabelle 1 aufgeführt. Die Stoff- und Informationsflüsse zwischen den Kompartimenten des Stickstoff- und Kohlenstoffmodells sind außerdem in Abbildung 1 bzw. Abbildung 2 dargestellt.

Tabelle 1 Überblick über die Zustandsvariablen von SIMULAT-NC.

| C-MODELL | | N-MODELL | |
|-----------------------------------|-----------|----------------------------------|-----------|
| Variable | Symbol | Variable | Symbol |
| Mikrobielle Aktivität (aerob)* | r | Mikrobielle Aktivität (aerob)* | r |
| Mikrobielle Aktivität (anaerob)* | r_{den} | Mikrobielle Aktivität (anaerob)* | r_{den} |
| Mikroorganismen-C | C_b | Mikroorganismen-N | N_b |
| Löslicher organischer Kohlenstoff | C_s | Labiler organischer Stickstoff | N_d |
| Labiler organischer Kohlenstoff | C_d | Stabiler organischer Stickstoff | N_h |
| Stabiler organischer Kohlenstoff | C_h | Gelöstes Ammonium | NH_4^+ |
| Kohlendioxid | CO_2 | Sorbiertes Ammonium | NH_{4s} |
| | | Gelöstes Nitrat | NO_3^- |
| | | Nitrit | NO_2^- |
| | | Distickstoffoxid | N_2O |
| | | Molekularer Stickstoff | N_2 |

* Die mikrobiellen Aktivitäten r und r_{den} sind für das C- und N-Modell jeweils identisch.

Die Änderung jeder Zustandsvariablen wird in Zeitschritten von einem Tag für eine horizontale Bodenschicht von 10 cm Stärke berechnet. Das im folgenden Text beschriebene System von Differentialgleichungen wird für jede dieser als homogen angenommenen Bodenschichten numerisch gelöst. Es wird über eine frei wählbare Anzahl von Bodenschichten gerechnet. Der Stoffaustausch zwischen den Schichten wird für die wasserlöslichen Stoffe (die Modellvariablen NO_3^- , C_s) über die vertikale Bewegung der wässrigen Phase ermittelt. Die Berechnungen werden im Stofftransportmodell von SIMULAT durchgeführt (für eine Kurzbeschreibung siehe Kapitel 4). Die nichtlöslichen organischen Stoffe verbleiben in der jeweiligen Bodenschicht, lediglich bei Bodenbearbeitungsmaßnahmen, wie z.B. dem Pflügen, erfolgt eine Durchmischung der Schichten über die jeweilige Bearbeitungstiefe.

Die organische Substanz des Bodens (ohne mikrobielle Biomasse) wird in drei Kompartimente unterteilt, die durch unterschiedliche Umsatzraten, d.h. in der Philosophie des Modells, durch eine unterschiedliche mikrobielle Verwertbarkeit charakterisiert sind: (1) Die stabile und sehr langsam abbaubare größtenteils humifizierte organische Fraktion, repräsentiert durch die Modellvariablen C_h und N_h , die den Hauptanteil der nativen organischen Bodensubstanz ausmacht, (2) die labile und mittelschnell abbaubare Fraktion C_d und N_d , die in erster Linie die Funktion hat, die polymeren, d.h. wasserunlöslichen Bestandteile der Ernteresiduen aufzunehmen und (3) die wasserlösliche Fraktion C_s , die als einzige organische Fraktion von den Mikroorganismen des Bodens direkt verwertet werden kann und ein Abbauprodukt der beiden vorgenannten Fraktionen darstellt. Es wird angenommen, dass Ammonium als direktes Mineralisierungsprodukt der polymeren Bodensubstanz auftritt. Die Biomasse der Mikroorganismen des Bodens wird über die Modellvariablen C_b und N_b beschrieben. Sie greifen über einen variablen aktiven Anteil r in die Stoffumsätze des Bodens ein.

Die Konzentrationen der mineralischen N-Verbindungen im Boden werden über vier Stoffkompartimente abgebildet: Dies sind (1) Nitrat (NO_3^-), (2) Ammonium in wässriger Lösung

(NH_4^+), (3) an der Bodenmatrix sorbiertes Ammonium (NH_{4s}) sowie (4) Nitrit (NO_2^-). Außerdem behandelt das Modell die Bildung der gasförmigen Komponenten Kohlendioxid (CO_2), Distickstoffoxid (N_2O) und molekularen Stickstoff (N_2). Innerhalb des Gesamtmodells werden so insgesamt 29 Stoffflüsse beschrieben: 18 innerhalb des N-Modells (siehe Abbildung 1) und 11 innerhalb des C-Modells (siehe Abbildung 2).

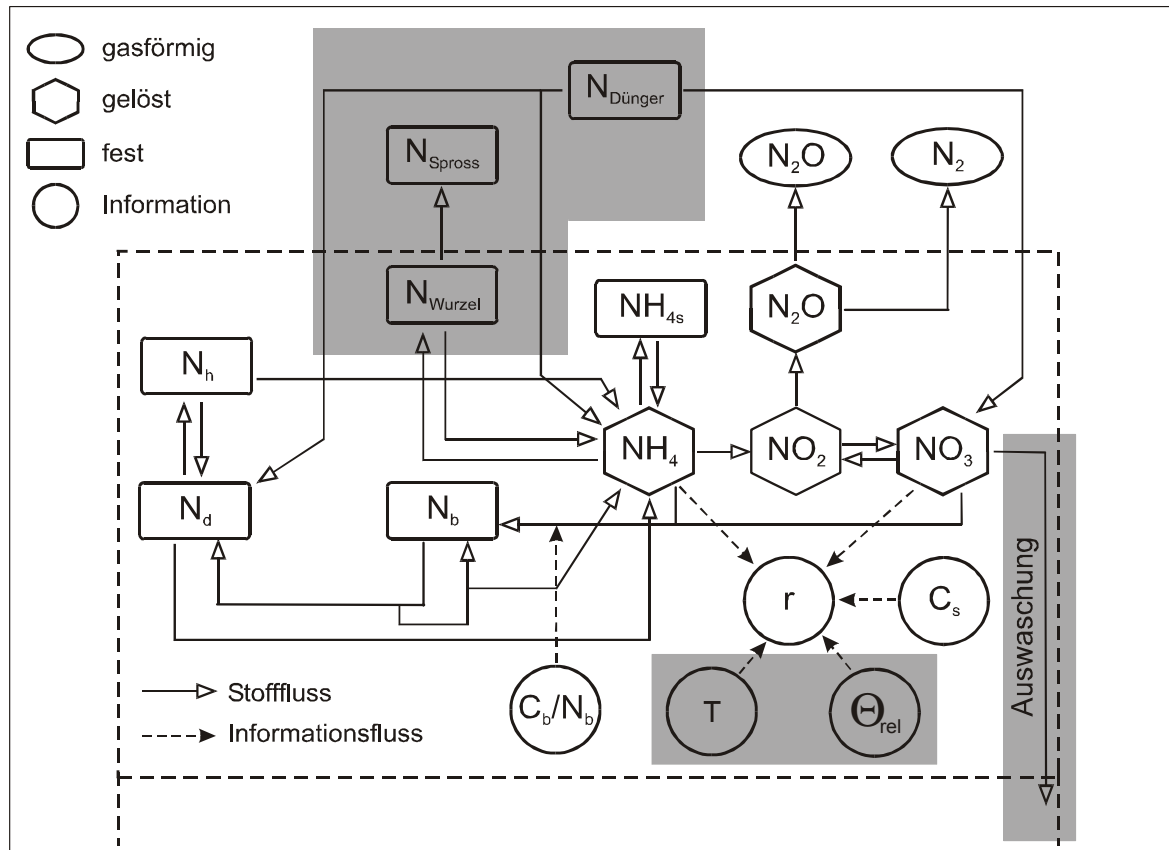


Abbildung 1 Flussdiagramm des Stickstoffmoduls von SIMULAT-NC. Die Zustandsvariable mikrobielle Aktivität r wirkt sich auf die Raten aller biotischen Stoffflüsse aus, an denen heterotrophe Mikroorganismen beteiligt sind. Diese Informationsflüsse sind der Übersichtlichkeit halber nicht im Diagramm dargestellt. „ Θ_{rel} “ steht für den relativen Bodenwassergehalt, „ T “ für die Bodentemperatur. Für die Bedeutung der übrigen Variablen siehe Tabelle 1. Die grau hinterlegten Rechtecke beinhalten Eingabegrößen aus den SIMULAT-Teilmodellen für Pflanzenwachstum, Stofftransport, Bodentemperatur und den Bodenwassergehalt.

Die Verbindung zwischen den organischen C- und N-Komponenten des Modells geschieht über die jeweilige Abbaukonstante, die für den C- und N-Anteil eines Kompartimentes den gleichen Wert aufweist. Durch die Flüsse zwischen den Stoffkompartimenten mit unterschiedlichem C/N-Verhältnis, wie z.B. durch das Absterben der mikrobiellen Biomasse oder die Zufuhr von Ernteresiduen, hat insbesondere der labile Pool (C_d , N_d) ein stark variierendes C/N-Verhältnis. Auch die mikrobielle Biomasse weist ein je nach Aktivitätsstatus und N-Angebot variierendes C/N-Verhältnis auf.

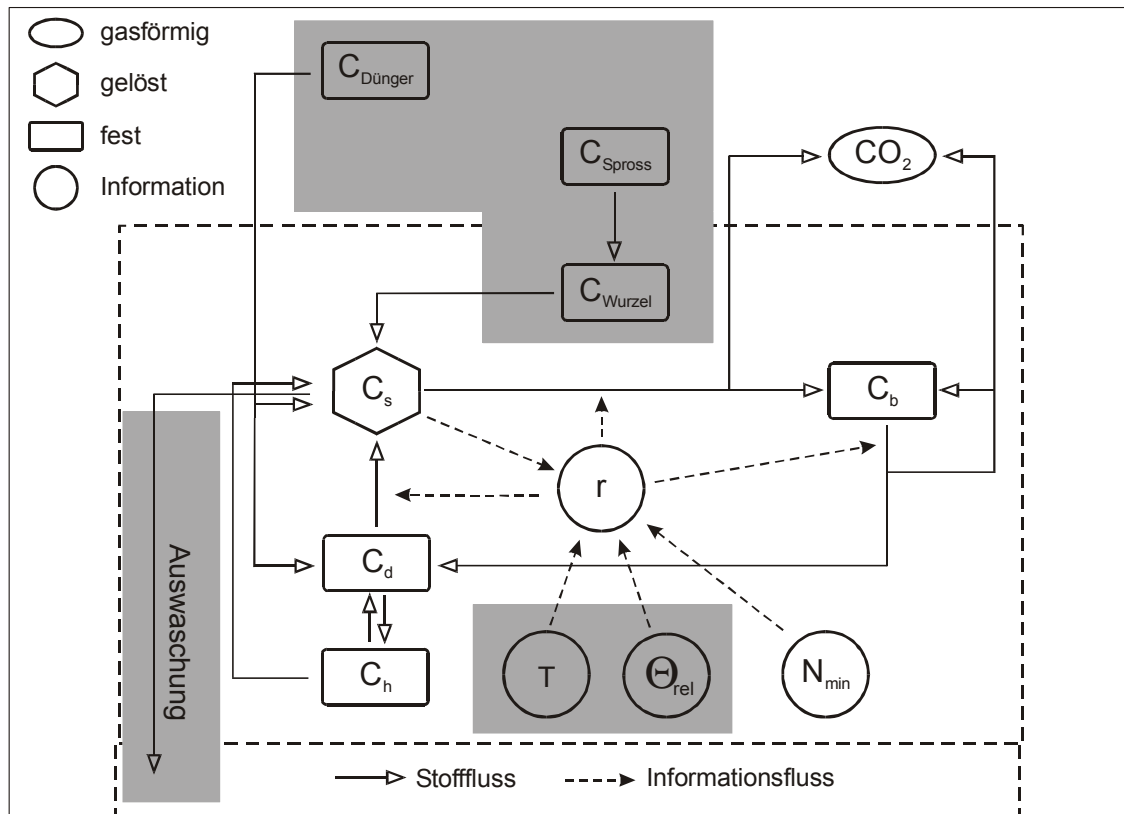


Abbildung 2 Flussdiagramm des Kohlenstoffmoduls von SIMULAT-NC. „ θ_{rel} “ steht für den relativen Bodenwassergehalt, „ T “ für die Bodentemperatur. Für die Bedeutung der übrigen Variablen siehe Tabelle 1. Die grau hinterlegten Rechtecke beinhalten Eingangsgrößen aus den SIMULAT-Teilmodellen für Pflanzenwachstum, Stofftransport, Bodentemperatur und den Bodenwassergehalt.

Eine weitere zentrale, aber nichtstoffliche Zustandsgröße in SIMULAT-NC ist die mikrobielle Aktivität r . Eine grundlegende Annahme des Modells besteht darin, dass die Geschwindigkeit aller biogenen Transformationsprozesse im Boden nicht nur durch die Konzentration an mikrobiellem Kohlenstoff C_b , sondern ebenso durch die Aktivität der Mikroorganismenpopulation im Boden gesteuert wird. Am Anfang der Modellbeschreibung steht daher die Darstellung der funktionalen Zusammenhänge, die die mikrobielle Aktivität r steuern sowie die Gleichungen für die Wachstumsdynamik der Mikroorganismenpopulation, die ebenfalls eng mit der mikrobiellen Aktivität gekoppelt ist.

2.2 Aktivität und Wachstum der Mikroorganismen im Boden

In diesem Kapitel wird zunächst geklärt, was im Kontext des vorgestellten Modells unter mikrobieller Aktivität zu verstehen ist und welche Rolle sie für die im Boden ablaufenden Transformationsprozesse spielt. Außerdem werden die Gleichungen für die Wachstumsdynamik der Mikroorganismen im Boden beschrieben.

2.2.1 Konzept der mikrobiellen Aktivität und ihrer Änderung

Ein Ackerboden ist dadurch gekennzeichnet, dass, anders als z.B. in einem Grünlandsystem, die Versorgung mit organischer Substanz als Kohlenstoff- und Energiequelle über das Jahr gesehen stark variieren kann. Es wird angenommen, dass diese Schwankungen in Menge und Zusammensetzung der organischen Substanz dazu führen, dass wechselnde Anteile der mikrobiellen Population des Bodens aktiv sind und die Stoffumsätze im Boden dominieren. Die Mikroorganismengruppen, deren Nährstoffversorgung durch Mangel gekennzeichnet ist, verfallen dagegen in einen Ruhe- bzw. dormanten Zustand und werden erst dann wieder aktiv, wenn sich ihre Nährstoffversorgung verbessert. Diese „Arbeitsteilung“ versetzt die Population in die Lage, auf ständig wechselnde Substratzusammensetzungen zu reagieren, so dass ein völliges Aussterben der Gesamtpopulation verhindert wird. Dabei sind die Mikroorganismen in ihrer Fähigkeit, unterschiedliche Substrate zu verwerten, ebenso heterogen, wie es die organische Substanz des Bodens ist.

In mathematischen Modellen wird diese Heterogenität der Mikroorganismen oft durch Einführung von zwei und mehr diskreten Populationen berücksichtigt. Einem Ansatz von WINOGRADSKY (1949) folgend, werden die aerob lebenden heterotrophen Organismen, die für einen Großteil der Mineralisierungstätigkeit im Boden verantwortlich sind, in zwei Gruppen unterteilt. Einem Teil der Gesamtpopulation wird die Dynamik der zymogenen Fraktion zugeordnet, die durch schnelles Wachstum auf frischer organischer Substanz und schnelles Absterben bei Substratmangel charakterisiert ist. Die zweite Fraktion bekommt die kinetischen Eigenschaften der autochthonen Fraktion mit einem geringen, aber ausdauernden Aktivitätsniveau, das durch langsamen Abbau der stabilen organischen Bodensubstanz aufrecht erhalten wird. Modellbeispiele für diesen Ansatz sind zu finden in KERSEBAUM & RICHTER (1994), WHITMORE & PARRY (1988) oder VAN VEEN et al. (1985). Eine weitere Möglichkeit besteht darin, die Gesamtpopulation in Bakterien und Pilze/Actinomyceten zu unterteilen. Dieser Ansatz ist in den Modellen von MCGILL et al. (1981) oder HENRIKSEN & BRELAND (1999) realisiert, wobei letztere zusätzlich eine dritte inaktive Population einführen.

Ein Nachteil der beschriebenen Unterteilungen besteht darin, dass sich die Anzahl der zu schätzenden Modellparameter und Anfangswerte verdoppelt bis verdreifacht. Hinzu kommt, dass eine Bestimmung der Wachstums- und Abbauparameter von Teilpopulationen im komplexen System Boden ungleich schwieriger ist, als Messungen für eine Gesamtpopulation durchzuführen.

Diese Umstände machen einen Ansatz attraktiv, der ohne die schwer fassbare Unterteilung der mikrobiellen Gesamtpopulation auskommt und trotzdem die gesamte Bandbreite ihrer Wachstums- und Abbaudynamiken erfasst: PANIKOV (1995) definiert mit einer "variable of physiological state" r eine Größe im Intervall $[0,1]$, die, vereinfacht formuliert, den zellinternen Anteil an Substanzen beschreibt, deren Konzentration ansteigt, wenn eine Zelle wächst. Bei diesen Substanzen handelt es sich um Ribonukleinsäuren (RNS), aber auch um Schlüssel-

enzyme, deren Konzentration positiv mit der Wachstumsrate korreliert ist. Demgegenüber steht der Anteil $(1-r)$ derjenigen Zellkomponenten, die eher für Überdauerungsfunktionen zuständig sind und deren Konzentration unter Bedingungen ansteigt, die für das Wachstum ungünstig sind. Zu diesen Komponenten gehören z.B. Speichersubstanzen wie Stärke und Glykogen, aber auch einige Pigmente, deren Konzentration negativ mit dem RNS-Gehalt der Zellen korreliert ist. Für eine genauere Beschreibung und Diskussion der Herleitung von r sei auf PANIKOV (1995) verwiesen.

Wird die „variable of physiological state“, die im folgenden Text als mikrobielle Aktivität r bezeichnet wird, sowohl mit der Konzentration an mikrobiellem C (C_b) als auch mit den spezifischen maximalen Umsatzraten für die Substanzklassen des Modells multipliziert, dann erhält man den Anteil der Mikroorganismenpopulation, der aktiv am betrachteten Umsetzungsprozess beteiligt ist. Der verbleibende Anteil $(1-r)$ wird als der dormante Anteil der Population definiert, der nicht an Abbauprozessen beteiligt ist. Die Angaben über den aktiven Anteil der Mikroorganismenpopulation reichen von 10 % unter Freilandbedingungen (JOERGENSEN et al., 1994) bis zu <1 % in Böden mit länger anhaltendem Substratmangel unter Laborbedingungen (BLAGODATSKY et al., 2000).

Multipliziert man die Aktivität r zusätzlich mit den maximalen Wachstums- und Sterberaten der mikrobiellen Biomasse, so lässt sich eine Populationsdynamik simulieren, die sich, je nach Umweltbedingungen, in einem Kontinuum zwischen dem zymogenen und dem autochthonen Pol bewegt. Die Mikroorganismen können mit schnellem Wachstum auf vorteilhafte Umweltbedingungen reagieren und weisen aufgrund des hohen r -Wertes gleichzeitig eine hohe Sterberate auf. Bei Substratmangel wird dagegen der gesamte Stoffwechsel verlangsamt, d.h. es werden sowohl Wachstum als auch Absterben verlangsamt, vergleichbar einer Situation, in der der autochthone Anteil der Biomasse die Dynamik der Gesamtpopulation dominiert.

Für die Stofftransformationen im Boden ist nicht nur die aktuelle Aktivität der Mikroorganismen von Interesse, sondern auch, wie schnell sich der Aktivitätsstatus der Population als Reaktion auf einen Impuls aus der Umwelt verändert (die Reaktionszeit der Mikroorganismenpopulation). Zellen benötigen eine gewisse Zeit, um ihren Stoffwechsel aus dem Ruhestadium heraus in einen aktiv wachsenden Zustand zu überführen. Um schnell ablaufende Prozesse abzubilden, sollte neben der aktuellen Aktivität auch die Geschwindigkeit der Änderung dieser Aktivität beschrieben werden, was im Modell über eine eigene Differentialgleichung realisiert wird. Die Geschwindigkeit der Anpassung (dr/dt) ist proportional zur aktuellen mikrobiellen Wachstumsrate $\mu(C_s)$, d.h. je größer die aktuelle Wachstumsgeschwindigkeit der Mikroorganismenpopulation ist, desto schneller kann die Gesamtpopulation auf wechselnde Umweltbedingungen reagieren. Außerdem ist die Rate proportional zum Gradienten zwischen der aktuellen Aktivität r und der Aktivität Φ , die potenziell unter den veränderten Umweltbedingungen erreichbar ist.

Die potenzielle Aktivität Φ wird, wie z.B. bei PARNAS (1975), in Abhängigkeit von der Verfügbarkeit der zwei wichtigsten Makronährstoffe für heterotrophe Mikroorganismen des Bodens, nämlich Stickstoff in Form von mineralischem Stickstoff (N_{min}) und Kohlenstoff in Form der wasserlöslichen Kohlenstoffverbindungen C_s , beschrieben. Außerdem werden die Witterungsbedingungen, in Form des relativen Bodenwassergehaltes Θ_{rel} , als indirektes Maß für den Sauerstoffgehalt des Bodens sowie die Bodentemperatur T berücksichtigt. Die allgemeine Formulierung für die Änderungsrate der mikrobiellen Aktivität r lautet damit:

$$\frac{dr}{dt} = \mu(C_s) \cdot [\Phi(C_s, N_{min}, T, \Theta_{rel}) - r] \quad (4)$$

Alle Teilfunktionen der potenziellen Aktivität sind auf eins normiert, so dass sich die aktuelle Aktivität r (bei einem Anfangswert $0 \leq r \leq 1$) ebenfalls im Intervall $[0,1]$ bewegt.

Die mikrobielle Aktivität wirkt sich auf die Dynamik der Stoffumsätze im Boden auf zweierlei Weise aus:

1. Die Raten aller Umwandlungsprozesse der organischen und anorganischen Substanz im Boden, an denen die heterotrophen Mikroorganismen beteiligt sind, werden mit dem Aktivitätsfaktor r multipliziert. So bewirkt eine hohe Aktivität der Population eine Beschleunigung dieser Prozesse, während eine Verringerung der Aktivität, z.B. durch Substratmangel, die Umwandlungsprozesse mehr und mehr verlangsamt.
2. Die Raten für Wachstum und Absterben der Mikroorganismen werden mit dem Aktivitätsfaktor multipliziert. Stehen große Mengen direkt verwertbaren Substrates (C_s , N_{min}) zur Verfügung, weist die Mikroorganismenpopulation des Bodens sehr schnelle Umsatzzeiten auf, d.h. sie wächst sehr schnell, stirbt aber ebenso schnell wieder ab. Die Geschwindigkeit des Stoffdurchsatzes ist damit nicht proportional zum sichtbaren Wachstum der Biomassekonzentration im Boden. Bei Substratmangel wird dagegen sowohl das Wachstum als auch das Absterben verlangsamt, so dass die Mikroorganismenpopulation überdauern kann, ohne völlig auszusterben.

Im Modell wird unterschieden zwischen der Aktivität r einer aeroben heterotrophen Population und der Aktivität r_{den} einer anaeroben heterotrophen Population (Denitrifikanten). Die anaerobe Population beginnt aktiv zu werden, sobald der relative Bodenwassergehalt einen kritischen Wert übersteigt und so weit anaerobe Verhältnisse verursacht, dass potenzielle Denitrifikanten ihren Stoffwechsel auf den Sauerstoffmangel einstellen und beginnen, NO_3^- , NO_2^- und N_2O ($=\text{NO}_x$) als Elektronenakzeptoren zu verwerten. Die Einführung einer zweiten Aktivitätsfunktion r_{den} , die den Aktivitätszustand der Denitrifikantenpopulation ebenfalls in Abhängigkeit von Substratverfügbarkeit und Witterungsbedingungen beschreibt, erlaubt eine konsistente Simulation der Aktivität der heterotrophen mikrobiellen Population, bestehend

aus Aerobiern und Anaerobiern. Die Funktion r_{den} unterscheidet sich von der Funktion r durch die Form und Zusammensetzung der Responsefunktionen für die Substratverfügbarkeit und die Witterungsbedingungen (siehe Kapitel 2.2.1.2). Alle spezifischen maximalen Umsatzkonstanten für die im Modell betrachteten Kompartimente bleiben unverändert, werden aber unter anaeroben Bedingungen mit r_{den} anstatt mit r multipliziert.

2.2.1.1 Die mikrobielle Aktivität unter aeroben Bedingungen

Einfluss der Substratverfügbarkeit

Für die Darstellung des Zusammenhangs zwischen mikrobieller Aktivität r und Substratverfügbarkeit wird eine Sättigungskurve in Form einer Michaelis-Menten-Funktion gewählt, die einen Maximalwert von eins erreichen kann (siehe Abbildung 3a, b). Als potenziell limitierendes Substrat werden ein Teil der wasserlöslichen Kohlenstofffraktion C_s als Lieferant für Energie und Biomassesubstanz (die Herleitung des verwertbaren Anteils $Fr(C_h)$ ist in Kapitel 2.2.2.1 zu finden) sowie mineralischer Stickstoff in Form von NO_3^- und NH_4^+ als wichtiger Nährstoff für den Biomasseaufbau angenommen. Die substratabhängigen Steuerfunktionen $R(C_s)$ und $R(N_{min})$ der mikrobiellen Aktivität r lauten dann:

$$R(C_s) = \frac{Fr(C_h) \cdot C_s}{K_{rCs} + Fr(C_h) \cdot C_s} \quad (5)$$

bzw.

$$R(N_{min}) = \frac{N_{min}}{K_{rN} + N_{min}} \quad (6)$$

mit:

| | | |
|---------------------|---|--|
| C_s : | Konzentration wasserlösliches Kohlenstoffsubstrat | [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] |
| N_{min} : | Konzentration mineralisches N (NH_4^+ -N + NO_3^- -N)- | [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] |
| K_{rCs}, K_{rN} : | Halbsättigungskonstanten für C_s bzw. N_{min} | [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] |
| $Fr(C_h)$: | Anteil des mikrobiell verfügbaren löslichen C-Substrates | [-] |

Nähern sich C_s oder N_{min} dem Wert null, so geht auch die mikrobielle Aktivität r der Mikroorganismen gegen null, die Population geht in den dormanten Zustand über. Stehen dagegen unbegrenzte Substratmengen zur Verfügung (N_{min} und $C_s \gg K_{rN}$ bzw. K_{rCs}), so nähert sich die mikrobielle Aktivität (bei optimalen Witterungsbedingungen) ihrem Maximalwert eins.

Die Verknüpfung der Funktionen $R(C_s)$ und $R(N_{min})$ für aerobe Bedingungen erfolgt nach dem Liebig'schen Minimumprinzip, d.h. der Minimumwert der zwei Funktionen wirkt als limitierender Faktor und bestimmt damit die potenzielle Aktivität der Mikroorganismenpopulation bei wechselnder Substratversorgung. Der Verlauf der Steuerfunktionen für das Kohlenstoff-

und das Stickstoffsubstrat ist in Abbildung 3a und b dargestellt.

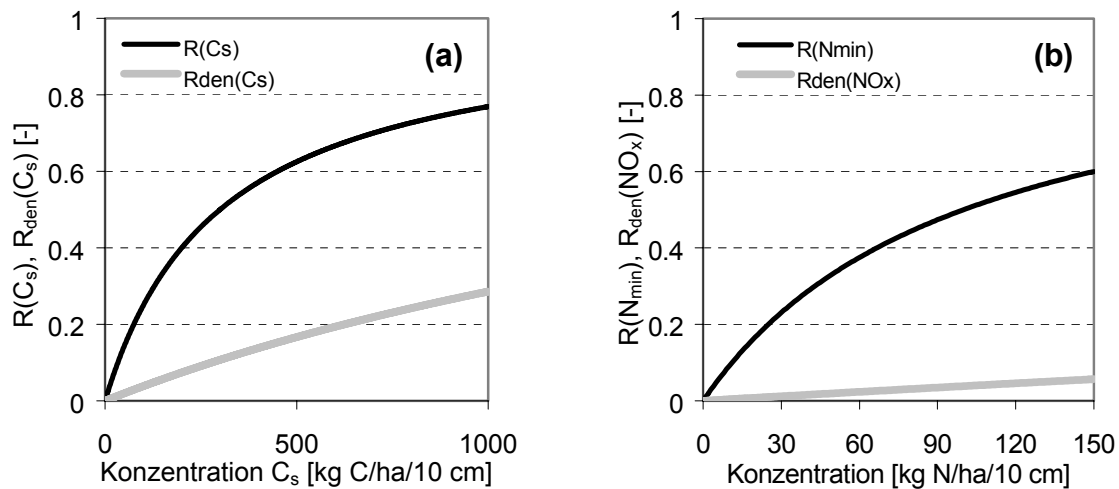


Abbildung 3 Verlauf der Steuerfunktionen für den Einfluss der Substratversorgung auf die mikrobielle Aktivität unter aeroben und anaeroben Bedingungen: (a) Steuerfunktionen $R(C_s)$ und $R_{den}(C_s)$ für das Kohlenstoffsubstrat. (b) Steuerfunktionen $R(N_{min})$ und $R_{den}(NO_x)$ für die mikrobielle N-Versorgung. Die Aktivitätsfunktion r_{den} und die zugehörigen Steuerfunktionen für anaerobe Bedingungen werden in Kapitel 2.2.1.2 beschrieben.

In Abbildung 3 sind zum Vergleich auch die substratabhängigen Steuerfunktionen $R_{den}(C_s)$ und $R_{den}(NO_x)$ für anaerobe Bedingungen dargestellt. Ihre Beschreibung erfolgt in Kapitel 2.2.1.2, die Parameterwerte für die abgebildeten Kurvenverläufe sind in Kapitel 2.5.3 und 2.5.4 zu finden.

Witterungseinflüsse

Die mikrobielle Aktivität und damit die Geschwindigkeit mikrobieller Stoffumsätze kann unter Freilandbedingungen entscheidend von Witterungsbedingungen, wie Temperatur und Niederschlägen, beeinflusst werden. So können extreme Temperaturen und Bodenwassergehalte die beschriebenen Auswirkungen der Substratverfügbarkeit auf die mikrobielle Aktivität überlagern. Werden einem Boden bei sehr niedriger Bodentemperatur oder großer Trockenheit größere Mengen an schnell abbaubarer organischer Substanz zugefügt, wird die mikrobielle Aktivität niedrig bleiben und ein Abbau des organischen Materials nur in geringem Maße erfolgen. In SIMULAT-NC werden die Auswirkungen der Variabilität von Bodentemperatur und Bodenwassergehalt daher direkt in die Funktion für die mikrobielle Aktivität r (bzw. r_{den}) integriert.

Einfluss der Bodentemperatur

Die Geschwindigkeit biologischer Umsätze und damit die mikrobielle Aktivität steigt im Allgemeinen bei Überschreitung des Gefrierpunktes exponentiell mit der Temperatur an, flacht bis zum Erreichen des Temperaturoptimums etwas ab, um sich nach Überschreiten des Optimums wieder zu verringern. Eine Untersuchung der Temperaturfunktionen von neun C-N-Modellen ergab, dass die in diesen Modellen am häufigsten verwendete Arrhenius- oder van't

Hoff-Funktion zu einer Überschätzung der Umsatzraten bei höheren Temperaturen führte (RODRIGO et al., 1997).

Für die Modellierung des Temperatureinflusses auf die mikrobielle Aktivität wird in SIMULAT-NC eine Funktion nach O'NEILL (1968) verwendet. Diese Funktion weist mit einer Optimumtemperatur T_{opt} und einer Letaltemperatur T_{max} zwei Größen auf, die es erlauben, den für biologische Prozesse typischen Verlauf der Temperaturabhängigkeit nachzubilden. Die temperaturabhängige Steuerfunktion für die mikrobielle Aktivität $R(T)$ lautet dann folgendermaßen:

$$R(T) = \left(\frac{T_{max} - T}{T_{max} - T_{opt}} \right)^a \cdot \exp \left(\frac{a \cdot (T - T_{opt})}{T_{max} - T_{opt}} \right) \quad (7)$$

mit

$$a = \frac{\left(b \cdot \left(1 + \sqrt{1 + \frac{40}{b}} \right) \right)^2}{400} \quad (8)$$

und

$$b = (q - 1) \cdot (T_{max} - T_{opt}) \quad (9)$$

| | | | |
|-----|-------------|-------------------------------------|------|
| mit | T_{max} : | Letaltemperatur | [°C] |
| | T_{opt} : | Temperaturoptimum | [°C] |
| | T : | Tagesmittelwert der Bodentemperatur | [°C] |
| | q : | Anpassungsparameter | [-] |

Der Parameter q bestimmt gemeinsam mit der Optimaltemperatur die Sensitivität der Funktion bei einer Temperaturänderung. Je größer der Wert von q gewählt wird, desto steiler ist der Verlauf der Funktion, wobei die O'Neill-Funktion für $q > 1,0$ definiert ist. Der Abfall der mikrobiellen Aktivität bei hohen Temperaturen, wie sie z.B. beim Abbau von Herbiziden beobachtet wird (NÖRTERSHEUSER, 1993), lässt sich über die Letaltemperatur T_{max} explizit berücksichtigen. Unterschreitet die Bodentemperatur T einen Wert von -2°C wird die Steuerfunktion $R(T)$ auf null gesetzt. Damit wird berücksichtigt, dass auch nahe 0°C Bodentemperatur noch Umsatzprozesse in einem Ausmaß stattfinden, das nach FRANKO (1990) nicht vernachlässigt werden sollte. Der Verlauf der temperaturabhängigen Steuerfunktion unter aeroben Bedingungen $R(T)$ und zum Vergleich für anaerobe Bedingungen $R_{den}(T)$ ist in Abbildung 4a dargestellt. Die Temperaturabhängigkeit der mikrobiellen Aktivität unter anaeroben Bedingungen wird in Kapitel 2.2.1.2 beschrieben.

Einfluss des Bodenwassergehaltes

Der Bodenwassergehalt kann in Mitteleuropa zwischen extremer Trockenheit im Sommer bis hin zu langen Phasen der Wassersättigung im Winter und Frühling variieren. Die Konsequenzen für die mikrobielle Aktivität und die Stoffumsätze sind weitreichend: Ein geringer Wassergehalt beeinträchtigt den Substrattransport, den Abtransport toxisch wirkender Stoffwechselprodukte und darüber die Aktivität der Mikroorganismenpopulation, erlaubt aber eine optimale Sauerstoffversorgung (SKOPP et al., 1990). Ein steigender Wassergehalt fördert dagegen die Mobilität von Substrat und Mikroorganismen, hemmt aber zunehmend den Sauerstofftransport in die Bodenporen.

Für die Modellierung des Einflusses, den der Bodenwassergehalt auf die mikrobielle Aktivität ausübt, wird eine Funktion nach RICHTER (1985) verwendet. Sie weist, wie auch die Temperaturfunktion, ein Optimum auf, bei dessen Über- oder Unterschreitung sich die Aktivität der aeroben Mikroorganismen verringert: Dieses Maximum liegt nach LINN & DORAN (1984) und Anderen bei einer relativen Wassersättigung von etwa 0,6. Ab einer relativen Wassersättigung von 0,61 beobachteten GRUNDMANN & ROLSTON (1987) bei Feldexperimenten den Beginn einer N₂O-Entwicklung. Für SIMULAT-NC wird der Wert von $\Theta_{rel} = 0,61$ dahingehend interpretiert, dass die aeroben Mikroorganismen ab diesem Wassergehalt in ihrer Aktivität stark beeinträchtigt werden, während die Aktivität der anaeroben Mikroorganismen zu steigen beginnt. Das heißt, ab diesem relativen Wassergehalt schaltet das Modell auf anaerobe Bedingungen um und es wirkt nur noch die Steuerfunktion $R_{den}(\Theta_{rel})$ für die anaerobe Mikroorganismenpopulation. Die Steuerfunktion für die Aktivität der aeroben Population wird auf null gesetzt (siehe auch Abbildung 4b):

$$R(\Theta_{rel}) = \begin{cases} \left(\frac{\Theta_{rel}}{\Theta_{opt}} \right)^\lambda \cdot \exp \left(1 - \left(\frac{\Theta_{rel}}{\Theta_{opt}} \right)^\lambda \right) & \text{für } 0.0 \leq \Theta_{rel} \leq 0.61 \\ 0 & \text{für } 0.61 < \Theta_{rel} \leq 1.0 \end{cases} \quad (10)$$

mit: Θ_{opt} : optimale relative Wassersättigung [cm³ cm⁻³]
 λ : Formparameter [-]

und

$$\Theta_{rel} = \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right) \quad (11)$$

mit den bodenspezifischen Größen:

θ : volumetrischer Wassergehalt [cm³ cm⁻³]

| | | |
|--------------|-------------------------|---------------------------------|
| θ_s : | Sättigungswassergehalt | $[\text{cm}^3 \text{ cm}^{-3}]$ |
| θ_r : | residualer Wassergehalt | $[\text{cm}^3 \text{ cm}^{-3}]$ |

Der Sättigungswassergehalt θ_s entspricht dem Porenvolumen des Bodens. Der residuale Wassergehalt θ_r ist gleichzusetzen mit dem minimalen Wassergehalt, dem sich die Wasserspannungskurve bei Entwässerung asymptotisch nähert (MONTENEGRO FERRIGNO, 1995). Dieser Wert wird oft vereinfachend auf den Wert null gesetzt, kann allerdings nach MONTENEGRO FERRIGNO (ebd.) auch dem Wassergehalt am permanenten Welkepunkt (d.h. pF 4,2) gleichgesetzt werden.

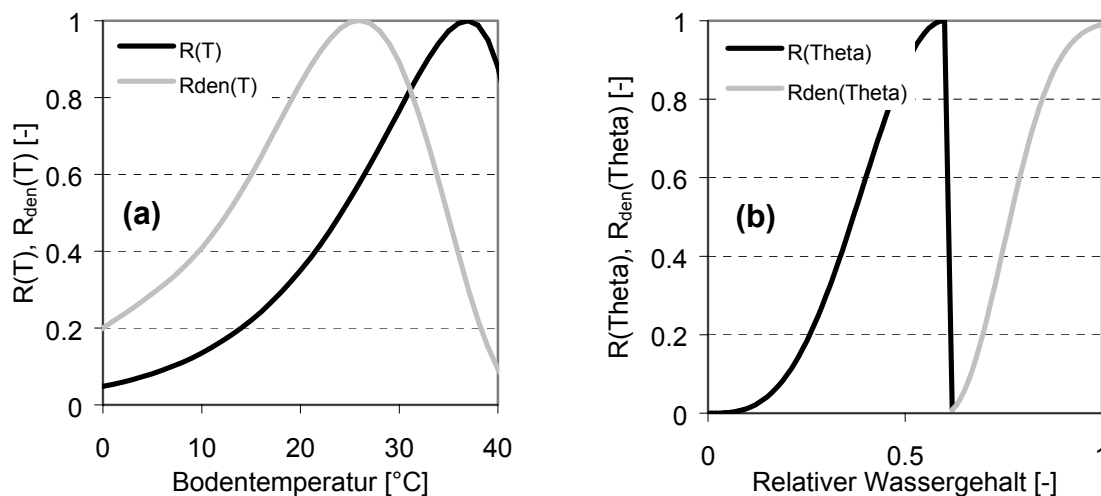


Abbildung 4 Verlauf der Steuerfunktionen für die Abhängigkeit der mikrobiellen Aktivität von den Witterungsbedingungen: (a) Verlauf der Funktion $R(T)$ (bzw. $R_{den}(T)$ unter anaeroben Bedingungen) für die Abhängigkeit der mikrobiellen Aktivität von der Bodentemperatur. (b) Verlauf der Steuerfunktion für die Abhängigkeit der mikrobiellen Aktivität vom Bodenwassergehalt unter aeroben ($R(\Theta_{rel})$) und unter anaeroben Bedingungen ($R_{den}(\Theta_{rel})$).

2.2.1.2 Die mikrobielle Aktivität unter anaeroben Bedingungen

Die mikrobielle Aktivität unter anaeroben Bedingungen r_{den} steht für den Anteil der heterotrophen Mikroorganismenpopulation im Boden, die auch bei geringem Sauerstoffpartialdruck aktiv sind (Denitrifikanten). Der Anteil der Denitrifikanten an der Mikroorganismenpopulation des Bodens lässt sich allerdings schwer quantifizieren. Die Literaturangaben über den Anteil der Gesamtpopulation, der in der Lage ist, unter anaeroben Bedingungen zu wachsen, schwanken nach FOCHT & VERSTRAETE (1977) zwischen einigen Zehntel Prozenten und der Hälfte der Biomasse, je nachdem, wie die Mikroorganismenzahl ermittelt wird. LEFFELAAR & WESSEL (1988) variieren den Anfangswert für den denitrifizierenden Populationsanteil in ihrem Modell zwischen 2 % und 60 %. In jedem Fall wird angenommen, dass der aktive Denitrifikantenanteil geringer ist als der aktive Anteil an Aerobiern unter vergleichbaren Bedingungen ohne Sauerstoffmangel. So hat ein anaerober Zustand des Bodens in SIMULAT-NC zur Folge, dass (1) Stickstoff in Form von gasförmigem N_2O und N_2 gebil-

det wird und dass (2) die Geschwindigkeit aller Stoffumsätze im Boden durch die Herabsetzung der mikrobiellen Aktivität (= wachsender Anteil der Anaerobier an der Gesamtpopulation) stark vermindert werden. Letzteres stimmt mit Beobachtungen von DEVEVRE & HORWATH (2000) überein, die für anaerobe Bedingungen eine Abnahme der Mineralisierungsrate um 75 bis 90 % festgestellt haben. Wie weit die Umsatzgeschwindigkeit tatsächlich absinkt, hängt nicht nur vom Sauerstoffgehalt des Bodens ab, sondern - wie unter aeroben Bedingungen auch - ebenso von der Temperatur und der Substratverfügbarkeit für die anaerob aktiven Mikroorganismen. In SIMULAT-NC werden daher neben dem relativen Wassergehalt und der Temperatur auch die N- und die C-Verfügbarkeit berücksichtigt.

Einfluss der Substratverfügbarkeit

Die stickstoffabhängige Steuerfunktion $R_{den}(NO_x)$ der mikrobiellen Aktivität unter anaeroben Bedingungen r_{den} weist gegenüber der Formulierung für die Aktivität unter aeroben Bedingungen zwei Veränderungen auf: Zum Einen werden statt der NH_4^+ - und der NO_3^- - Konzentrationen die Konzentrationen der Stickoxide NO_3^- , NO_2^- und N_2O berücksichtigt. Zum Anderen werden diese N-Verbindungen bei Sauerstoffmangel sowohl für den Aufbau von Biomasse wie auch für den Energieumsatz verbraucht, d.h. sie haben die gleiche Doppelfunktion inne wie die löslichen Kohlenstoffverbindungen. Diese doppelte Funktion der Stickoxide wird bei der mikrobiellen Aktivität unter anaeroben Bedingungen berücksichtigt, indem die Halbsättigungskonstante für das Stickstoffsubstrat (K_{rNden}) im nährstoffabhängigen Teil der r_{den} -Funktion den gleichen Wert bekommt wie die Halbsättigungskonstante für das C-Substrat (K_{rCden}).

Basierend auf dem Modellteil für die heterotrophe Denitrifikation (siehe Kapitel 2.4.1.2) dient die Gesamtheit der im Modell berechneten Stickoxidkonzentrationen NO_x ($= NO_3^- + NO_2^- + N_2O$) als potenziell aktivitätslimitierender Faktor:

$$R_{den}(NO_x) = \frac{NO_x}{K_{rNden} + NO_x} \quad (12)$$

mit:

$$\begin{array}{ll} NO_x: & \text{Gesamtkonzentration an } NO_3^-, NO_2^- \text{ und } N_2O \quad [kg \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}] \\ K_{rNden}: & \text{Halbsättigungskonstante für } NO_x \quad [kg \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}] \end{array}$$

Die kohlenstoffabhängige Steuerfunktion $R_{den}(C_s)$ der mikrobiellen Aktivität r_{den} wird analog zur Funktion im aeroben Modellteil formuliert:

$$R_{den}(C_s) = \frac{f_r \cdot C_s}{K_{rCden} + f_r \cdot C_s} \quad (13)$$

mit

K_{rCden} : Halbsättigungskonstante für C_s unter anaeroben Bedingungen [kg ha⁻¹ 10 cm⁻¹]

Die Verläufe für die Steuerfunktionen $R_{den}(NO_x)$ und $R_{den}(C_s)$ sind in Abbildung 3a und b zu finden.

Einfluss der Bodentemperatur

Beim Einfluss der Bodentemperatur auf die mikrobielle Aktivität wird für anaerobe Bedingungen eine komplexere Funktion gewählt als die bereits beschriebene Funktion für aerobe Bedingungen. Um der Beobachtung gerecht zu werden, dass nach dem Auftauen des Bodens im Winter/Frühling, d.h. bei sehr niedrigen Temperaturen, bereits eine N₂O-Entwicklung stattfindet (siehe z.B. LEMKE et al., 1998, MOGGE et al., 1999 und RÖVER et al., 1998), wird eine Funktion verwendet, die zwei Maxima aufweist. Dieser Formulierung liegt die Annahme zugrunde, dass sich ein Teil der Denitrifikantenpopulation dem Umstand angepasst hat, dass durch Wassersättigung bedingte anaerobe Zustände im mittel- bis nordeuropäischen Klima oft mit niedrigen Temperaturen einhergehen. Diese Annahme stimmt mit der Beobachtung von PANIKOV (1995) überein, der für die CO₂-Freisetzung in einem westsibirischen Boden ebenfalls eine Temperaturfunktion mit zwei deutlichen Maxima fand. Auch hier wird die Anpassung eines Teils der Mikroorganismenpopulation an kalte Bedingungen als die wahrscheinlichste Ursache für ein zusätzliches Maximum bei niedrigen Temperaturen angenommen.

Um zwei Maxima definieren zu können, setzt sich die Steuerfunktion $R_{den}(T)$ aus zwei Teilen zusammen:

$$R_{den}(T) = R_1(T) + R_2(T) \quad (14)$$

Bei $R_1(T)$ handelt es sich um eine Temperaturfunktion nach O'CONNELL (1990), die für die Beschreibung der Temperaturabhängigkeit von Respiration und Mineralisierungsprozessen im Boden entwickelt wurde. Diese Funktion erlaubt die Definition des ersten Temperaturoptimums T_{opt1} :

$$R_1(T) = \exp \left(-\alpha + \beta \cdot T \cdot \left[1 - 0.5 \cdot \frac{T}{T_{opt1}} \right] \right) \quad (15)$$

mit

$$\begin{array}{ll} \alpha, \beta: & \text{Parameter} \quad [-] \\ T_{opt1}: & \text{erstes Temperaturoptimum} \quad [^\circ\text{C}] \end{array}$$

Der Parameter α bestimmt den Maximalwert der Funktion $R_1(T)$ beim ersten Temperaturoptimum. Je größer der Absolutwert von α gewählt wird, desto kleiner ist der Wert von $R_1(T)$. Der Wert von β bestimmt, zusammen mit dem Wert von T_{opt1} , die Sensitivität der Funktion im

Hinblick auf eine Änderung der Temperatur. Die Funktion $R_I(T)$ deckt den niedrigen Temperaturbereich ab.

Als zweite Funktion wird die bereits beschriebene Funktion nach O'Neill eingesetzt (siehe Gleichung 4). Sie erlaubt die Definition des zweiten Temperaturoptimums T_{opt2} bei einer höheren Temperatur als T_{opt1} sowie einen Wert für die Letaltemperatur T_{max2} der Denitrifikantenpopulation.

Die Steuerfunktion $R_{den}(T)$ wird bei einer Bodentemperatur von $T < -2^\circ\text{C}$ auf den Wert null gesetzt, da FEY et al. (1999) noch bei Temperaturen bis $-1,5^\circ\text{C}$ in 10 cm Tiefe die Bildung von N_2O feststellten.

Einfluss des Bodenwassergehaltes

Um den Einfluss des Bodenwassergehaltes auf die Aktivität der Mikroorganismen unter anaeroben Bedingungen zu erfassen, wird die Bodenwasserfunktion für die aerobe Population modifiziert. Sobald der relative Wassergehalt den optimalen Wert für die aerobe Population übersteigt ($\Theta_{rel} > 0,61$), beginnt die anaerobe Population aktiv zu werden und der Funktionswert von $R_{den}(\Theta_{rel})$ beginnt zu steigen, bis er bei Wassersättigung den Maximalwert 1,0 erreicht. Die bodenwasserabhängige Steuerfunktion für die mikrobielle Aktivität r_{den} erhält damit die folgende Form:

$$R_{den}(\Theta_{rel}) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0,0 \leq \Theta_{rel} \leq 0,61 \\ 1 - \left(\frac{\Theta_{rel}}{\Theta_{opt}} \right)^\lambda \cdot \exp \left(1 - \left(\frac{\Theta_{rel}}{\Theta_{opt}} \right)^\lambda \right) & \text{für } 0,61 < \Theta_{rel} \leq 1,0 \end{cases} \quad (16)$$

Der Verlauf der Bodenwasserfunktion für die mikrobielle Aktivität unter anaeroben und unter aeroben Bedingungen ist in Abbildung 4b zu sehen.

2.2.1.3 Kombinierte Wirkung von Witterungs- und Substrateinfluss auf die mikrobielle Aktivität

Der gemeinsame Einfluss, den Temperatur und Bodenwassergehalt sowie die Substratverfügbarkeit auf die mikrobielle Aktivität r (bzw. r_{den}) ausüben, kann im Modell auf unterschiedliche Art und Weise formuliert werden. Die Art der Verknüpfung hat, wie im Folgenden gezeigt wird, Konsequenzen für die zeitliche Dynamik der Mineralisierung der organischen Substanz und das mikrobielle Wachstum. Um die Konsequenz unterschiedlicher Verknüpfungen von Witterungsfaktoren und Substrateinfluss zu untersuchen und die plausibelste Art zu identifizieren, wurde ein 30-tägiges Simulationsexperiment durchgeführt, in dessen Verlauf ein kräftiger Temperaturrückgang stattfindet, wie er z.B. im Frühling unter Freilandbedingungen vorkommen kann. Alle anderen Bedingungen, die einen Einfluss auf die mikrobielle Aktivität haben (Bodenwassergehalt, C_s und N_{min}), bleiben auf einem optimalen Niveau. Das Ziel

des Experimentes besteht darin, zu untersuchen, wie sich charakteristische Modellvariablen bei unterschiedlicher Verknüpfung relativ zueinander verhalten, wenn sich die Witterungsbedingungen schrittweise verändern. Die Anfangswerte für die Zustandsvariablen des Modells und die Modellparameter für das simulierte Experiment stammen aus einem Inkubationsversuch von SMITH et al. (1986), der auch zur Ermittlung der Modellparameter dient (siehe Kapitel 2.2). Die Faktoren, die die mikrobielle Aktivität bestimmen, wurden im Experiment folgendermaßen eingestellt:

Die Temperatur wird von Tag 1 bis 10 konstant bei 25°C gehalten, fällt dann bis Tag 13 auf 7°C ab und bleibt bis zum Ende der Simulationsperiode auf diesem Niveau. Der relative Wassergehalt liefert mit $\Theta_{rel} = 0,57$ nahezu optimale Bodenwasserbedingungen. Um zu erreichen, dass die mikrobielle Aktivität nicht durch Substratmangel eingeschränkt wird, erfolgt eine kontinuierliche Zufuhr von wasserlöslichem C-Substrat C_s (umgerechnet 50 kg ha⁻¹ 10 cm⁻¹ alle zwei Tage) und mineralischem Stickstoff N_{min} (10 kg N ha⁻¹ 10 cm⁻¹ alle zwei Tage).

Es wurden vier Varianten der Integration der Klimafunktionen $R(T)$ und $R(\Theta_{rel})$ in das Modell untersucht. Bei einer von ihnen erfolgt eine Integration in klassischer Weise über direkte Multiplikation mit den maximalen Umsatzraten des Modells (Variante 1), bei den verbleibenden drei werden die Steuerfunktionen in die Funktion für die mikrobielle Aktivität integriert (Variante 2 bis 4).

Variante 1: Unter der Annahme, dass Temperatur und Bodenwassergehalt die Bodenprozesse unabhängig voneinander beeinflussen, werden die Steuerfunktionen $R(\Theta_{rel})$ und $R(T)$ multiplikativ verknüpft und werden anschließend mit den maximalen Abbaukonstanten $\eta_{S_{imax}}$ und der maximalen mikrobiellen Wachstumsrate $\mu_{C_{smax}}$ multipliziert. Die mikrobielle Aktivität r hängt in diesem Fall ausschließlich von der mikrobiellen Wachstumsrate und der Substratverfügbarkeit ab. Sie ist damit nur indirekt, über den Einfluss der Witterung auf die Substratkonzentration und die mikrobielle Wachstumsrate, von Temperatur und Wassergehalt des Bodens abhängig. Allgemein lässt sich der Abbau eines Substrates S_i (mit $S = N$ bzw. C und $i = s, d, h$) für Variante 1 folgendermaßen beschreiben:

$$\frac{dS_i}{dT} = \frac{\eta_{S_{imax}} \cdot R(\Theta_{rel}) \cdot R(T) \cdot S_i \cdot r \cdot C_b}{K_{S_i} + S_i} \quad (17)$$

Die mikrobielle Sterberate, die die Neubildungsrate der organischen Substanz und die Geschwindigkeit der Stickstoffremineralisierung beeinflusst (siehe Kapitel 2.2.2), wird bei dieser Variante nur durch die Temperaturfunktion reduziert. Sie wird im Gegensatz zum mikrobiellen Wachstum unabhängig vom Wassergehalt formuliert, da dieser im Wesentlichen die Hemmung des Substrattransportes widerspiegeln soll, der für den mikrobiellen Absterbeprozess nur eine untergeordnete Rolle spielt.

Variante 2: Hier werden die Steuerfunktionen für Temperatur und Wassergehalt als weitere Teilfunktionen in die Aktivität r integriert. Der Minimumwert der vier Steuerfunktionen für N_{min} - und C_s -Verfügbarkeit bzw. Temperatur und Bodenwassergehalt fungiert als begrenzender Faktor für die mikrobielle Aktivität. Durch diese Konstruktion kann auch bei ausreichender Substratversorgung entweder die Temperatur oder der Wassergehalt allein die potenzielle Aktivität der Biomasse bestimmen. Die r -Funktion erhält bei Variante 2 die folgende Form:

$$\frac{dr}{dt} = \mu(C_s) \cdot (\text{Min}[R(N_{min}), R(C_s), R(T), R(\Theta_{rel})] - r) \quad (18)$$

Variante 3: Eine weitere Möglichkeit der Integration der Witterungsfunktionen besteht darin, dass Substratverfügbarkeit, Temperatur und Bodenwassergehalt gemeinsam die mikrobielle Aktivität bestimmen. Für diesen Fall werden die Steuerfunktionen für Temperatur und Bodenwassergehalt in der r -Funktion multiplikativ mit den Steuerfunktionen für N_{min} oder C_s verknüpft:

$$\frac{dr}{dt} = \mu(C_s) \cdot (\text{Min}[R(N_{min}) \cdot R(T) \cdot R(\Theta_{rel}), R(C_s) \cdot R(T) \cdot R(\Theta_{rel})] - r) \quad (19)$$

So reduzieren suboptimale Witterungsbedingungen die Aktivität, die durch die Substratverfügbarkeit potenziell erreichbar wäre.

Variante 4: Ähnlich wie in Variante 3 bestimmen hier die Witterungsbedingungen gemeinsam mit den Substratverhältnissen die potenzielle mikrobielle Aktivität. In Anlehnung an RODRIGO et al. (1997) wird aber das Minimum der Steuerfunktionen für Temperatur und Wassergehalt verwendet und multiplikativ mit $R(N_{min})$ oder $R(C_s)$ verknüpft:

$$\frac{dr}{dt} = \mu(C_s) \cdot (\text{Min}[R(N_{min}) \cdot \text{Min}[R(T), R(\Theta_{rel})], R(C_s) \cdot \text{Min}[R(T), R(\Theta_{rel})]] - r) \quad (20)$$

Ergebnis der Simulationsexperimente

Es wird untersucht, wie sich die unterschiedliche Art der Einbindung der Witterungsfunktionen auswirkt auf (1) die mikrobielle Aktivität r , (2) die Rate der CO_2 -Entwicklung und (3) die mikrobielle Biomassekonzentration C_b . Wie in Abbildung 5 zu sehen ist, haben die vier untersuchten Varianten der Integration teilweise sehr unterschiedliche Dynamiken für diese Zustandsvariablen zur Folge.

Bei Variante 1, bei der die Witterungsfunktionen multiplikativ mit den Geschwindigkeitskonstanten für den Umsatz organischer Substanz und mikrobielles Wachstum verknüpft, aber nicht direkt in die r -Funktion integriert werden, führt der Temperaturrückgang zu einer kurzfristigen Akkumulation der kontinuierlich zugeführten löslichen organischen Substanz (C_s),

da das mikrobielle Wachstum durch den Temperaturrückgang verlangsamt wird. Da r ausschließlich von der Substratkonzentration abhängig ist, führt die C_s -Akkumulation, trotz des starken Temperaturabfalls, zu einer annähernden Verdopplung der mikrobiellen Aktivität (Var 1, Abbildung 5c). Gleichzeitig geht die Rate der CO_2 -Entwicklung zurück (Var 1, Abbildung 5d), so dass Mineralisierungsrate und mikrobielle Aktivität entkoppelt sind. Da in SIMULAT-NC die mikrobielle Aktivität über das mikrobielle Wachstum definiert wird und dieser Prozess mit dem Verbrauch von Energie und damit einer CO_2 -Entwicklung einhergeht, sind die gegenläufigen Trends für die mikrobielle Aktivität r und die Rate der CO_2 -Entwicklung nicht plausibel.

Bei Variante 2 werden $R(T)$ und $R(\theta_{rel})$ gleichberechtigt neben $R(N_{min})$ und $R(C_s)$ in die Minimumfunktion von r einbezogen. Hier hat der Temperaturrückgang keine Auswirkungen, da der Funktionswert von $R(T)$ auch bei $7^\circ C$ immer noch etwas höher liegt als der Wert für die Substratfunktion $R(C_s)$. Damit wird die Temperatur als limitierender Faktor nicht wirksam, d.h. eine Absenkung der Temperatur um $12^\circ C$ führt bei diesem Ansatz zu keinem nennenswerten Rückgang der mikrobiellen Aktivität (Var 2, Abbildung 5c) und der Mineralisierungsrate (Var 2, Abbildung 5d), was einer Vielzahl von Beobachtungen widerspricht (JOERGENSEN et al., 1990, KIRSCHBAUM, 1995, LEIROS et al., 1999 u.a.).

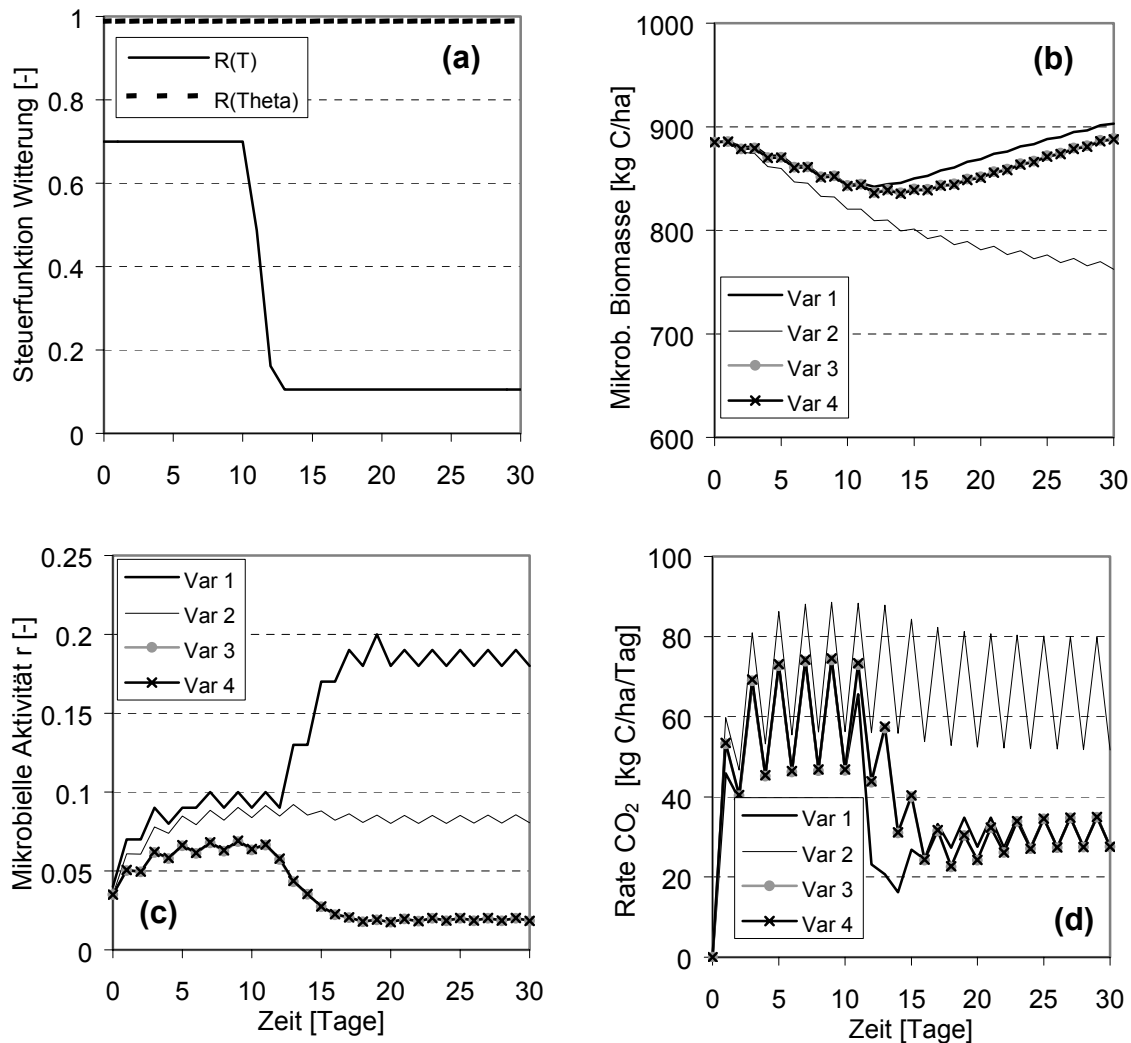


Abbildung 5 Konsequenzen von vier Arten der Kopplung zwischen Witterungsfunktion und mikrobieller Aktivität: (a) zeitlicher Verlauf der Steuerfunktionen der mikrobiellen Aktivität $R(T)$ und $R(\Theta_{rel})$ über den Simulationszeitraum von 30 Tagen, (b) Konzentrationsverlauf der mikrobiellen Biomasse (C_b), (c) zeitliche Änderung der mikrobiellen Aktivität r , (d) Rate der CO₂-Emissionen. Für eine Beschreibung der vier unterschiedlichen Varianten der Integration (Var 1 bis Var 4) sei auf den Text verwiesen.

Um zu gewährleisten, dass eine Änderung der Witterungsbedingungen (hier der Temperatur) einen kontinuierlichen Einfluss auf die Modellvariablen hat, wurden in Variante 3 und 4 die Steuerfunktionen für die Witterung innerhalb der r -Funktion mit den Steuerfunktionen für die Nährstoffverfügbarkeit verknüpft (siehe Gleichung 19 und 20). Diese Art der Kopplung hat eine unmittelbare Reaktion des Systems auf den Temperaturabfall zur Folge²: Die mikrobielle Aktivität r geht innerhalb weniger Tage um etwa 50 % zurück (Var 3 und Var 4 in Abbildung 5c). Der anfangs zurückgehende Trend der Biomassekonzentration C_b wird umgekehrt in einen leichten Wachstumstrend (Var 3 und Var 4 in Abbildung 5b). Diese Trendwende ist darauf zurückzuführen, dass zwar sowohl die mikrobielle Wachstums- als auch die Sterberate

² Die Funktionsverläufe sind für beide Varianten nahezu identisch, da in Variante 4 die Temperaturfunktion allein wirksam wird, während in Variante 3 die Temperaturfunktion durch nahezu optimale Bodenwasserbedingungen mit einem Wert nahe 1 multipliziert wird.

mit der zurückgehenden mikrobiellen Aktivität verknüpft sind, die Wachstumsrate aber außerdem von C_s abhängig ist, dessen Konzentration aufgrund der geringeren mikrobiellen Aktivität im Laufe der Szenarioperiode zunimmt, so dass das mikrobielle Wachstum stärker ausfällt als das Absterben. Die geringere Mineralisierungstendenz wird auch in Abbildung 5d (Var 3 und Var 4) über den Rückgang der Emissionsrate für CO_2 deutlich. Beide Arten der Integration liefern damit ein plausibles Modellverhalten. In das Modell integriert wird Variante 4 (Gleichung 20), bei der das Minimum der zwei Witterungsfunktionen verwendet wird. Diese Art der Formulierung berücksichtigt zumindest indirekt eine gegenseitige Beeinflussung der Temperatur- und Wassereffekte, was nach RODRIGO et al. (1995) und anderen für die mikrobielle Mineralisierungs- und Nitrifikationstätigkeit durchaus beobachtet wird.

Die Änderungsrate für die Aktivität der heterotrophen Mikroorganismen unter aeroben Bedingungen wird dann wie folgt formuliert (siehe auch Gleichung 20):

$$\frac{dr}{dt} = \mu(C_s) \cdot (\text{Min}[R(N_{\min}), \text{Min}[R(T), R(\Theta_{\text{rel}})]], R(C_s) \cdot \text{Min}[R(T), R(\Theta_{\text{rel}})]] - r) \quad (21)$$

Für anaerobe Bedingungen, d.h. für die Aktivität der Denitrifikantenpopulation, lautet die Gleichung entsprechend:

$$\frac{dr_{\text{den}}}{dt} = \mu(C_s) \cdot (\text{Min}[R_{\text{den}}(\text{NO}_x), \text{Min}[R_{\text{den}}(T), R_{\text{den}}(\Theta_{\text{rel}})]], R_{\text{den}}(C_s) \cdot \text{Min}[R_{\text{den}}(T), R_{\text{den}}(\Theta_{\text{rel}})]] - r_{\text{den}}) \quad (22)$$

2.2.2 Wachstumsdynamik der Mikroorganismen

Der mikrobiellen Biomasse des Ackerbodens werden im Modell zwei zentrale Funktionen zugeschrieben: (1) die Immobilisierung niedermolekularer wasserlöslicher C- und N-Verbindungen mit nachfolgendem Einbau in die organische Bodensubstanz durch das Absterben der Mikroorganismen und (2) der Abbau und die Mineralisierung der polymeren organischen Bodensubstanz und der Pflanzenresiduen, die zur Freisetzung niedermolekularer Verbindungen führen. Bestandteile der nativen organischen Bodensubstanz und der Pflanzenresiduen werden auf diese Art und Weise für die Pflanzen und die mikrobielle Biomasse selbst wieder verfügbar gemacht. Die folgende Beschreibung der Modellgleichungen für Wachstum und Absterben der mikrobiellen Biomasse erfolgt jeweils getrennt für den Kohlenstoff- und Stickstoffanteil der Population.

2.2.2.1 Populationsdynamik - Kohlenstoffanteil

Die (Netto-)Wachstumsrate dC_b/dt für den C-Anteil der Mikroorganismen wird über drei Terme berechnet: (1) einen Wachstumsterm $\mu(C_s)$ als Funktion der C_s -Konzentration, (2) ei-

nen Sterbeterm $\alpha(C_b)$ als Funktion der Biomassedichte und (3) einen Term, der die Wiederverwendung eines Anteils der abgestorbenen Biomasse beschreibt. Alle drei Raten werden proportional zur mikrobiellen Aktivität und zur Konzentration der mikrobiellen Biomasse formuliert:

$$\frac{dC_b}{dt} = r \cdot C_b \cdot (\mu(C_s) - \alpha(C_b) + \alpha(C_b) \cdot (1 - f_{Cd}) \cdot Y_{Cs}) \quad (23)$$

mit:

f_{Cd} : Anteil der toten Biomasse, der in den organischen Pool C_d überführt wird [-]
 Y_{Cs} : Substratnutzungseffizienz für C_s [-]

Mikrobielles Wachstum

Die Rate für das mikrobielle Wachstum wird in Abhängigkeit von der aktuellen mikrobiellen Biomasse C_b , der mikrobiellen Aktivität r sowie der Verfügbarkeit des löslichen C-Substrates C_s formuliert. Der Term $\mu(C_s)$ stellt in Anlehnung an MONOD (1949) das mikrobielle Wachstum in Abhängigkeit von der gemessenen Konzentration des limitierenden wasserlöslichen C-Substrates C_s dar:

$$\mu(C_s) = \frac{\mu_{C_s \max} \cdot Fr(C_h) \cdot C_s}{K_{C_s} + Fr(C_h) \cdot C_s} \quad (24)$$

mit:

$\mu_{C_s \max}$: maximale Wachstumsrate auf C_s [Tag⁻¹]
 K_{C_s} : Substrataffinität zu C_s [kg ha⁻¹ 10 cm⁻¹]

und mit dem mikrobiell verfügbaren C_s -Anteil:

$$Fr(C_h) = \begin{cases} 1 - \left(\frac{f_{Cs} \cdot C_h}{C_s + 1} \right) & \text{für } C_s > f_{Cs} \cdot C_h \\ 0 & \text{für } C_s \leq f_{Cs} \cdot C_h \end{cases} \quad (25)$$

f_{Cs} : Gleichgewichtsanteil C_s als Anteil von C_h [-]

Die Funktion $Fr(C_h)$ ist definiert für das Intervall [0,1]. Sie hat zur Folge, dass sich die Geschwindigkeit der mikrobiellen C_s -Verwertung bei hohen C_s -Konzentrationen der maximalen Geschwindigkeit annähert, während sie bei Annäherung an eine untere Grenzkonzentration

$f_{Cs} \cdot C_h$ schnell auf den Wert null abfällt (siehe Abbildung 6).

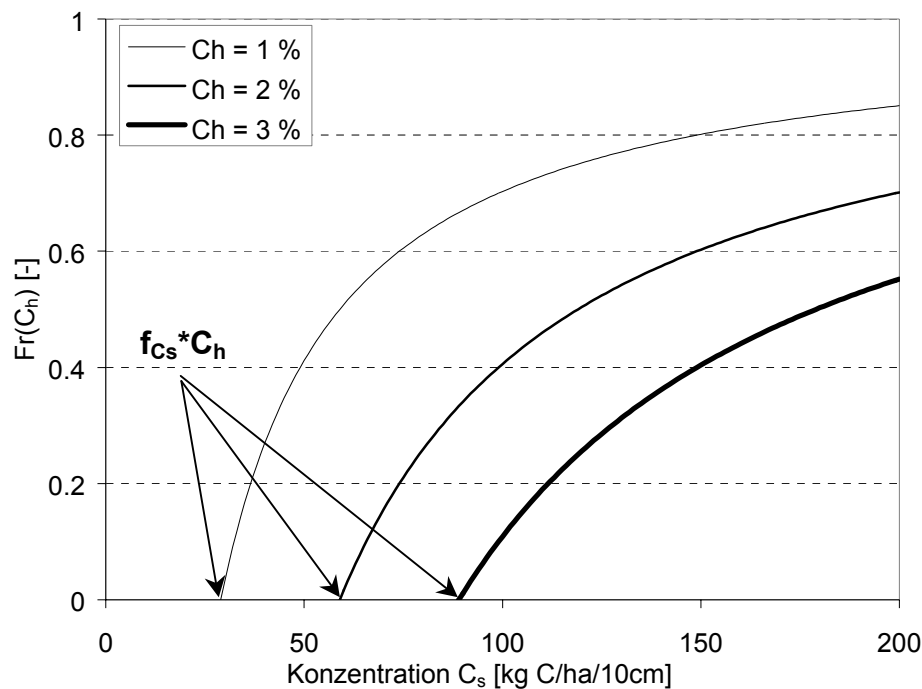


Abbildung 6 Verlauf der Funktion $Fr(C_h)$ bei Variation des organischen C-Gehaltes C_h im Boden zwischen 1 % und 3 %.

Durch die Funktion $Fr(C_h)$ wird berücksichtigt, dass die messbare Konzentration an löslichem Kohlenstoff im Boden nicht zu 100 % der mikrobiell verwertbaren Menge entspricht. Vielmehr besteht nach AZAM et al. (1989) ein gewisser Prozentsatz des wasserextrahierbaren organischen Materials aus schwer abbaubaren Verbindungen, wie z.B. Huminsäuren. Außerdem kann sich im ungestörten Boden im Freiland ein Teil des löslichen organischen C in nicht mikrobiell besiedelten Mikroporen befinden, so dass diese organische Substanz zwar messtechnisch erfasst wird, aber nicht verfügbar ist. Es kann also davon ausgegangen werden, dass die aus dem Boden extrahierten Mengen an wasserlöslichem Kohlenstoff die Konzentration an mikrobiell verfügbarem Substrat überschätzen (NUNAN et al, 2001). Eine Korrektur um den variablen Faktor $Fr(C_h)$ erscheint sinnvoll, da SIMULAT-NC für Freilandbedingungen konzipiert ist, wo dem Boden sowohl kontinuierlich kleine Mengen an schnellverwertbarem C-Substrat zufließen, als auch über die Ernteresiduen einmalig große Mengen an organischem Material zugeführt werden.

Der mikrobiell nicht verwertbare Anteil am wasserlöslichen Kohlenstoff wird im Modell aus dem Gehalt an organischer Substanz im Boden abgeschätzt. Nach GREGORICH et al. (2000) steht die Konzentration an wasserlöslichem C mit dem bodenbürtigen C-Pool im Gleichgewicht. Für das Modell wird diese Gleichgewichtskonzentration als Hinweis für den Anteil der C_s -Menge im Boden verwendet, der nicht mehr mikrobiell abbaubar ist. Die Menge an löslichem C im Boden bewegt sich in der Größenordnung zwischen 0,05 % bis 1 % des organischen Kohlenstoffes: GREGORICH et al. (2000) haben 0,05 bis 0,25 % der organischen Bodensubstanz in Form von löslichem C gefunden. Bei Inkubationsversuchen von SMITH et al.

(1986) wurde bei einer Konzentration zwischen 0,2 und 0,5 % der organischen Bodensubstanz der lösliche Kohlenstoff nicht weiter abgebaut. RÖVER & KAISER (1999) haben Gleichgewichtskonzentrationen von 0,4 bis 1,1 % der organischen Bodensubstanz gefunden. Bei all diesen Werten ist allerdings zu berücksichtigen, dass sie auf unterschiedlichen Extraktionsmitteln und -verfahren beruhen. Sie sind damit nicht direkt vergleichbar, sondern lediglich als Hinweis auf die Größenordnung des löslichen C-Anteils anzusehen. Im Modell wird die untere Grenzkonzentration für C_s ($Fr(C_h)=0$), f_{C_s} auf den Wert 0,002, d.h. auf 0,2 % von C_h gesetzt. Wie aus Abbildung 6 zu ersehen ist, ist bei hohen Konzentrationen an C_s der verwertbare C_s -Anteil bei Böden mit hohem organischen C-Gehalt niedriger als bei Böden mit geringerem Gehalt an organischem Material. Diesem Funktionsverlauf liegt die Annahme zugrunde, dass hohe C_s -Konzentrationen (z.B. bedingt durch die Zufuhr von Ernteresiduen) einen Anstieg der mikrobiellen Aktivität induzieren. Dieser Anstieg führt zu einem verstärkten Abbau der organischen Bodensubstanz. In Böden mit höherem organischen C-Gehalt wird dabei eine größere Menge an löslicher organischer Substanz, aber auch an nicht verwertbarem C freigesetzt, als aus Böden mit niedrigem organischen C-Gehalt.

Mortalitätsrate

Der zweite Term von Gleichung 23, die Mortalitätsrate $\alpha(C_b)$ der Mikroorganismen, wird von der mikrobiellen Aktivität r und der aktuellen Mikroorganismenkonzentration C_b gesteuert. Der Term $\alpha(C_b)$ setzt sich zusammen aus der maximalen Sterberate α_{max} und einer Funktion $Kap_\alpha(C_b)$, die die Sterberate α_{max} in Abhängigkeit von der mikrobiellen C-Konzentration C_b variiert:

$$\alpha(C_b) = \alpha_{max} \cdot Kap_\alpha(C_b) \quad (26)$$

mit

$$Kap_\alpha(C_b) = 15 \cdot \left(1 - \exp(-b \cdot C_b^2)\right) \quad (27)$$

| | | |
|------------------|--------------------------|---|
| α_{max} : | maximale Mortalitätsrate | [Tag ⁻¹] |
| b : | Parameter | [(kg C ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹) ⁻²] |

Hinter dieser Art, die Sterberate zu variieren, steht die Annahme, dass es auch bei unbegrenzter Substratverfügbarkeit und optimalen Witterungsbedingungen (d.h. $r \rightarrow 1$) kein unbegrenztes (Netto-)Wachstum geben kann. Die nach außen sichtbare Einschränkung des Wachstums kann im Modell entweder durch Verminderung der maximalen Wachstumsrate $\mu_{C_{smax}}$ erreicht werden oder durch Erhöhung der maximalen Sterberate α_{max} . Für SIMULAT-NC wird angenommen, dass sich die Sterberate mit zunehmend dichter werdender mikrobieller Besiedlung erhöht. Schnelles Wachstum, verbunden mit einer steigenden Besiedlungsdichte, führt zu ei-

ner behinderten Sauerstoff- und Substratdiffusion und einer erhöhten Konzentration an mikrobiellen, zum Teil toxischen Stoffwechselprodukten, die dazu führen, dass das betrachtete Habitat für die Mikroorganismenpopulation zunehmend unkomfortabler wird und sich die Sterberate erhöht.

Die Auswirkung der mikrobiellen Dichte auf die Sterberate wurde eingeführt, um eine beschleunigte Umwandlung von wasserlöslichem C und N_{\min} in die organische Bodensubstanz darzustellen, bei dem die Mikroorganismenpopulation als sehr kurzfristiger Zwischenspeicher für N_{\min} fungiert. Auf diese Art und Weise ließe sich das oft beobachtete Phänomen deuten, dass nach einer Düngerapplikation ein Großteil des mineralischen Stickstoffes sehr schnell aus der Bodenlösung "verschwindet", aber nicht in der mikrobiellen Biomasse nachweisbar ist. Eine mögliche Erklärung wäre die schnelle Überführung des Düngerstickstoffes über die mikrobielle Biomasse in die organische Bodensubstanz, wie ihn z.B. BENDING et al. (1998) annehmen, die keinen Anstieg des mikrobiellen Biomasse-N nachweisen konnten. Aufgrund der Größe des organischen Pools ist der „verschundene“ mineralische Stickstoff dort nur mit großem Messaufwand, wie z.B. mit ^{15}N markiertem Dünger, nachzuweisen. Die Ergebnisse entsprechender Experimente mit ^{15}N -markiertem Dünger werden von NIEDER et al. (1995a) in diese Richtung interpretiert.

Der Parameter b in Gleichung 27 wird so gewählt, dass die Funktion $Kap_{\alpha}(C_b)$, bei einer für den betrachteten Boden als charakteristisch angesehenen Biomassekonzentration C_b , den Wert eins annimmt. Unterschreitet die aktuelle Biomassekonzentration diese charakteristische Dichte, so wird die Sterberate verringert. Eine Überschreitung des Wertes führt dagegen zu einer Beschleunigung des Absterbens. Für die Ermittlung der typischen mikrobiellen Biomasse eines Bodens werden Angaben von ANDERSON & DOMSCH (1989) genutzt. Sie konnten, basierend auf der Untersuchung von 134 Agrarböden Mitteleuropas, einen signifikanten Zusammenhang herstellen zwischen dem organischen Kohlenstoffgehalt und der Bewirtschaftungspraxis eines Bodens einerseits und der mikrobiellen Biomassekonzentration C_b dieser Böden andererseits. In Abhängigkeit von der Bewirtschaftung und der Düngepraxis geben sie für den mikrobiellen Biomasseanteil eine Spanne von im Mittel 2,4 % (für Dauermonokulturen) bis 4 % (bei Zufuhr organischer Düngung) der organischen Bodensubstanz an. Der lineare Zusammenhang zwischen mikrobiellem Biomasseanteil und organischem C-Gehalt des Bodens ist nur gültig bis zu einem C_{org} -Gehalt von 2,5 %. Damit kann die charakteristische Biomasse-C-Konzentration für eine spezifische Bewirtschaftungs- und Düngeform näherungsweise ausgedrückt werden als eine Fraktion f_{Cb} der organischen Bodensubstanz C_h .

Die Auflösung von Gleichung 27 nach b und die Substitution der "typischen" mikrobiellen Biomasse (d.h. $Kap_{\alpha}(C_b) = 1$) durch $C_b^* = f_{Cb} \cdot C_h$ führt zu:

$$b = - \frac{\ln 0.93}{(f_{Cb} \cdot C_h)^2} \quad (28)$$

mit

f_{Cb} : „typischer“ Anteil Biomasse-C an organischer Bodensubstanz [-].

Die Funktion $Kap_{\alpha}(C_b)$ lautet dann:

$$Kap_{\alpha}(C_b) = 15 \cdot \left(1 - \exp \left(\frac{\ln 0.93}{(f_{Cb} \cdot C_h)^2} \cdot C_b^2 \right) \right) \quad (29)$$

Der Verlauf von $Kap_{\alpha}(C_b)$ für unterschiedliche organische C-Gehalte im Boden und unter der Annahme, dass die typische Biomasse-C-Konzentration $C_b = 2,5$ % von C_h beträgt, ist in Abbildung 7 wiedergegeben. Diese Funktion hat durch ihren direkten Bezug zur organischen Bodensubstanz den Vorteil, dass sie für unterschiedliche Böden und unterschiedliche Bodenschichten mit variablen C_h - und C_b -Konzentrationen eingesetzt werden kann (Pedotransferfunktion). Mit zunehmender Überschreitung der "typischen" Mikroorganismenkonzentration reagiert die Funktion immer sensibler, d.h. die effektive Sterberate wird größer und der Stoffdurchsatz der mikrobiellen Biomasse entsprechend schneller.

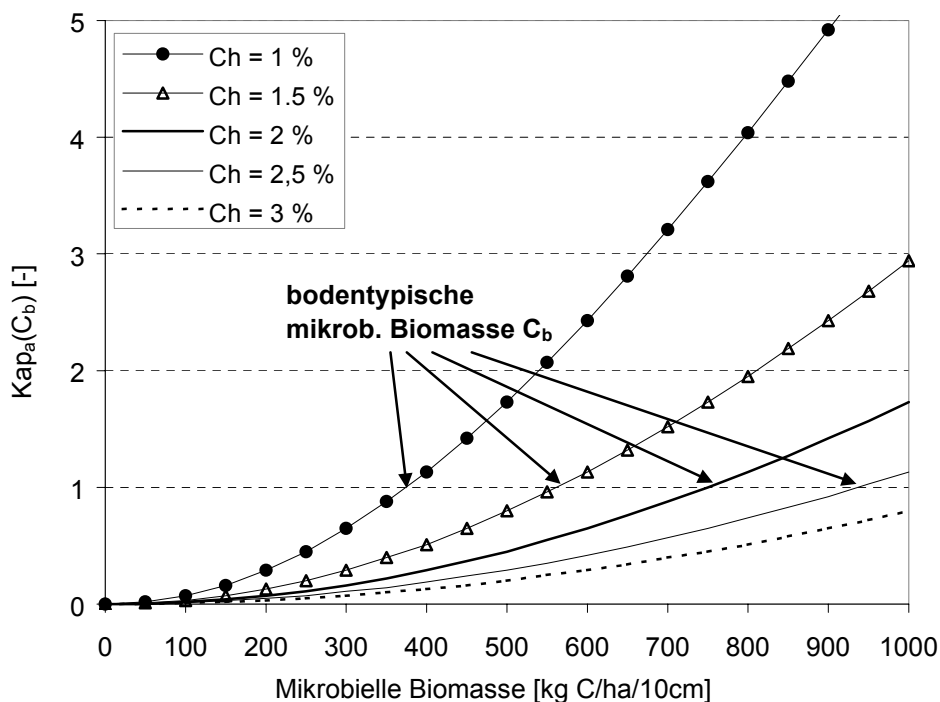


Abbildung 7 Verlauf der Funktion $Kap_{\alpha}(C_b)$ für unterschiedliche Gehalte des Bodens an organischer Bodensubstanz (C_h). Mit $C_b = 2,5$ % von C_h .

In Tabelle 2 sind typische Biomasseanteile im Boden für die von ANDERSON & DOMSCH untersuchten Bewirtschaftungsformen aufgeführt. Für die Simulation eines Standortes kann der Wert für f_{Cb} , je nach aktueller Bewirtschaftungsform des Schlages ausgewählt werden.

Für Böden mit wechselnder Fruchtfolge ergab sich nach Untersuchungen von ANDERSON & DOMSCH eine mikrobielle Biomassekonzentration in Höhe von 2,5 % der organischen Bodensubstanz. Dieser Wert wird in der vorliegenden Arbeit genutzt, wenn die Vorgeschichte eines Bodens nicht bekannt ist.

Tabelle 2 Mikrobielle Biomasse als Anteil der organischen Bodensubstanz C_{org} in Abhängigkeit von Bewirtschaftungsform und Düngepraxis (nach ANDERSON & DOMSCH, 1989).

| Bewirtschaftungsform | Art der Düngung | Biomasseanteil in % der org. Bodensubstanz |
|----------------------|--|--|
| Monokultur | NPK | 2,36 |
| | Stroh oder Wirtschaftsdünger | 2,57 |
| | Gründüngung oder Stroh und Gründüngung | 4,04 |
| | | |
| Fruchtwechsel | NPK | 2,90 |
| | Stroh oder Wirtschaftsdünger | 2,51 |
| | Gründüngung oder Stroh und Gründüngung | 3,71 |
| | | |

Für den dritten Term in Gleichung 23 ($\alpha(C_b) \cdot (1-f_{Cd}) \cdot Y_{Cs}$) wird davon ausgegangen, dass das Absterben der Mikroorganismen zu einer Lysis der Zellen führt, so dass der lösliche Anteil der Zellbestandteile ($1-f_{Cd}$) als Substrat für die lebenden Zellen zur Verfügung steht. MARUMOTO et al. (1982) haben mit Hilfe von Inkubationsversuchen mit ^{14}C - und ^{15}N -markierten Mikroorganismen herausgefunden, dass dieser Anteil bei 45 % der abgestorbenen Biomasse liegt, während 55 % in die organische Bodensubstanz überführt werden. Der dritte Term stellt somit den Anteil ($1-f_{Cd}$) der abgestorbenen und lysierten Biomasse dar, der noch im selben Zeitschritt als mikrobielles Substrat verwertet und in den Pool C_b rücküberführt wird. Der verbleibende Anteil f_{Cd} besteht aus den strukturbildenden Bestandteilen der abgestorbenen mikrobiellen Biomasse, wie z.B. Zellwandmaterial. Er wird in den labilen Kohlenstoffpool C_d überführt. Der Anteil Y_{Cs} der löslichen Fraktion der abgestorbenen Biomasse stellt die Substratnutzungseffizienz dar. Er wird für den Aufbau neuer mikrobieller Biomasse verwendet, während die Fraktion ($1-Y_{Cs}$) den Energieverbrauch bei der Verwertung der abgestorbenen mikrobiellen Substanz widerspiegelt und dem CO_2 -Pool zufließt.

2.2.2.2 Populationsdynamik - Stickstoffanteil

Der Kohlenstoff- und der Stickstoffanteil der mikrobiellen Biomasse sind über ein in Grenzen variables C/N-Verhältnis gekoppelt (siehe unten). Als mineralische N-Quelle dient der Mikroorganismenpopulation in erster Linie Ammonium (GISI, 1990, PANSU et al., 1998, PURI & ASHMAN, 1999), das als Mineralisierungsprodukt der N-haltigen organischen Bodensubstanz anfällt. Den Untersuchungen von MOLINA et al. (1990) folgend, wird in SIMULAT-NC organischer Stickstoff extrazellulär bis zur mineralischen Form (NH_4^+) umgewandelt und erst dann mikrobiell verwertet (Mineralization-Immobilization-Turnover, MIT-

Hypothese). In SIMULAT-NC wird unter aeroben Bedingungen auch NO_3^- für den Aufbau mikrobieller Biomasse verwertet, allerdings in geringerem Ausmaß als NH_4^+ .

Die (Netto-)Wachstumsrate des N-Anteils der mikrobiellen Biomasse wird in vier Termen beschrieben. Die N-Immobilisierung ist in den ersten zwei Termen von Gleichung 30 formuliert ($\mu(NO_3)$ bzw. $\mu(NH_4)$), der dritte Term stellt die Sterberate des N-Anteils der mikrobiellen Biomasse dar, während der vierte Term N_{rec} die Wiederverwertungsrate des N-Anteils der abgestorbenen und lysierten mikrobiellen Biomasse beschreibt:

$$\frac{dN_b}{dt} = (\mu(NH_4) + \mu(NO_3)) \cdot r \cdot C_b \cdot (NC_{bmax} - NC_b) - \alpha(C_b) \cdot r \cdot N_b - N_{rec} \quad (30)$$

mit:

| | | |
|---------------|--|-----|
| NC_{bmax} : | maximales N/C-Verhältnis der mikrobiellen Biomasse | [-] |
| NC_b : | aktuelles N/C-Verhältnis der mikrobiellen Biomasse | [-] |

N-Immobilisierung

Die Immobilisierung des mineralischen Stickstoffes durch die Mikroorganismenpopulation des Bodens wird in SIMULAT-NC über Michaelis-Menten-Kinetiken beschrieben:

$$\mu(NH_4) = \frac{\mu_{NH4max} \cdot (NH_4 - NH_4^*)}{K_{NH4} + (NH_4 - NH_4^*)} \quad (31)$$

mit

| | | |
|------------------|--|--|
| μ_{NH4max} : | maximale Immobilisierungsrate für NH_4^+ | [Tag ⁻¹] |
| NH_4^* : | NH_4^+ Grenzkonzentration | [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] |
| K_{NH4} : | Michaelis-Menten-Konstante für NH_4^+ | [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] |

und

$$\mu(NO_3) = \frac{\mu_{NO3max} \cdot (NO_3 - NO_3^*)}{K_{NO3} + (NO_3 - NO_3^*)} \quad (32)$$

mit

| | | |
|------------------|--|--|
| μ_{NO3max} : | maximale Immobilisierungsrate für NO_3^- | [Tag ⁻¹] |
| NO_3^* : | NO_3^- Grenzkonzentration | [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] |
| K_{NO3} : | Michaelis-Menten-Konstante für NO_3^- | [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] |

Da das Modell mit Labordaten kalibriert wird und auf Freilandbedingungen angewendet wer-

den soll, werden die Grenzkonzentrationen NO_3^* für Nitrat und NH_4^* für Ammonium eingeführt. Sie spiegeln die N-Mengen wider, die in ungestörten Böden mikrobiell nicht zugänglich sind, aber bei Laborinkubationen und N_{min} -Messungen durch Vorbehandlung der Böden (wie z.B. Zerkleinern und Sieben) freigesetzt werden. Die Werte für NO_3^* und NH_4^* liegen in der Größenordnung von $1-2 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$. Sie stellen die Konzentrationen dar, die unter Freilandbedingungen nicht mehr unterschritten werden.

Die maximalen Immobilisierungsraten für NO_3^- und für NH_4^+ werden wie bei BLAGODATSKY & RICHTER (1998) durch Multiplikation mit dem Term $(NC_{bmax} - NC_b)$ variiert. Dieser Term beschreibt die Differenz zwischen dem maximalen und dem aktuellen N/C-Verhältnis der mikrobiellen Biomasse. Die Größe NC_{bmax} stellt das maximale N/C-Verhältnis dar, das von der mikrobiellen Aktivität r abhängt:

$$NC_{bmax} = 0,07 \cdot r + 0,256 \quad (33)$$

Der Mikroorganismenpopulation wird hier mit wechselnder Aktivität eine variierende stoffliche Zusammensetzung zugeschrieben: Bei höherer Aktivität ist das C/N Verhältnis enger als bei niedrigerer Aktivität. Dies entspricht z.B. einem erhöhten Gehalt an N-haltigen Verbindungen wie Enzymen und RNS bei verstärktem Wachstum der Population (siehe Kapitel 2.2.1). Ein weiterer Erklärungsansatz ist, dass der Anteil der Bakterien an der Gesamtbiomasse bei hoher Konzentration an schnell verfügbarem Substrat steigt. Das C/N-Verhältnis von Bodenbakterien, die unter optimalen Bedingungen inkubiert werden, variiert zwischen 3 und 6, während Bodenpilze, ebenfalls unter optimalen Bedingungen, ein weiteres C/N-Verhältnis zwischen 7 und 12 aufweisen (JENKINSON, 1976, ANDERSON & DOMSCH, 1980, MOORE et al., 2000).

Der Gradient zwischen aktuellem und maximalem N/C Verhältnis ($NC_{bmax} - NC_b$) wirkt somit als Triebkraft der N-Immobilisierung. Das heißt, die N-Aufnahme der mikrobiellen Biomasse wird sowohl durch das äußere N-Angebot als auch einen inneren N-Sättigungsgrad gesteuert, vergleichbar zur Formulierung des Kohlenstoffkonsums der Mikroorganismen im Modell von SMITH (1982). Das minimale C/N Verhältnis (= maximale N/C Verhältnis) wird mit zunehmender Aktivität r immer enger. Es geht gegen $C/N = 3,9$, wenn $r \rightarrow 0$, während das C/N-Verhältnis sich dem Wert 3,1 annähert, wenn die Population ihre maximale Aktivität ($r \rightarrow 1$) erreicht.

Die variable Gestaltung des C/N-Verhältnisses der mikrobiellen Biomasse wird gestützt von Beobachtungen von MOORE et al. (2000), der in Abhängigkeit von der Feldfrucht eine sehr viel stärkere Fluktuation des Biomasse-N-Gehaltes als des Biomasse-C-Gehaltes fand. Diese Fluktuation führte an einem Untersuchungsstandort zu sehr engen mittleren C/N-Verhältnissen zwischen 3,5 (Alfalfa) und 5,2 (Mais). An einem anderen Untersuchungsstandort wurde eine Spanne von $C/N = 5,2$ (Mais) bis 16,3 (Hafer) gemessen. Die mikrobielle C/N-

Variation kann somit auch von den angebauten Feldfrüchten abhängig sein. DENDOOVEN et al. (2000) haben bei Inkubationsversuchen im Labor über einen Zeitraum von 180 Tagen einen Anstieg des mikrobiellen C/N-Verhältnisses von 3,6 (Tag 0) auf 7,8 (Tag 63) gefunden, das bis zum Tag 140 wieder auf 4,4 zurückging. Bei dem Versuch, die beobachtete NO_3^- -Dynamik und Mineralisierung der organischen Substanz mit einem Modell zu simulieren, ziehen auch sie ein variables C/N-Verhältnis der mikrobiellen Biomasse in Betracht. Auch VAN VEEN et al. (1984) erlauben in ihrem Modell eine Veränderung des C/N Verhältnisses zwischen 5 und 15 in Abhängigkeit von der Konzentration an mineralischem Stickstoff im Boden. Sie begründen dies mit der Beobachtung, dass Mikroorganismen in der Lage sind, auf erhöhten osmotischen Druck (z.B. bei Austrocknung des Bodens) mit der zellinternen Akkumulation von organischer Substanz, aber auch von Ionen, zu reagieren.

Mortalitätsrate

Der dritte Term in Gleichung 30 stellt die Mortalitätsrate des N-Anteils der mikrobiellen Biomasse dar. Die Formulierung entspricht der für den C-Anteil der mikrobiellen Biomasse. Für den letzten Term in Gleichung 30 wird angenommen, dass der lösliche N-Anteil ($1-f_{Cd}$) der abgestorbenen und lysierten Biomasse im selben Zeitschritt wieder verwertet wird:

$$N_{rec} = \alpha(C_b) \cdot r \cdot N_b \cdot (1 - f_{Cd}) \cdot \left(1 - \left(\frac{NC_b}{NC_{bmax}} \right) \right) \quad (34)$$

Die Geschwindigkeit der Wiederaufnahme wird, ähnlich wie die N_{min} -Immobilisierung, durch den Gradienten zwischen dem aktuellen und dem maximalen N/C-Verhältnis der mikrobiellen Biomasse gesteuert (im letzten Term von Gleichung 34 als Verhältnis der beiden Größen NC_b und NC_{bmax} ausgedrückt). Je näher das aktuelle N/C-Verhältnis der mikrobiellen Biomasse dem maximalen N/C-Verhältnis ist, desto mehr NH_4^+ wird auf diese Weise aus der abgestorbenen Biomasse in die Bodenlösung freigesetzt.

2.3 Umwandlung der organischen Bodensubstanz

Die organische Substanz des Bodens dient als Quelle lebensnotwendiger Nährstoffe für Mikroorganismen und Pflanzen sowie als mittel- bis langfristiger chemischer Speicher für Energie und Synthesematerial. Die organische Substanz wird in SIMULAT-NC vereinfachend in drei Kompartimente unterteilt, denen jeweils eine unterschiedliche maximale Abbaurate sowie eine unterschiedliche Rolle bei der Bereitstellung von Nährstoffen zugeordnet wird. Eine Unterscheidung zwischen wasserlöslicher und wasserunlöslicher organischer Substanz ist messtechnisch noch möglich und aus der Sicht des gewählten Modellansatzes mit seinem starken Fokus auf die Dynamik des mikrobiellen Biomasse-Pools auch notwendig. Eine weitere Unterteilung des hochpolymeren Anteils ist jedoch extrem schwierig, da diese organische Substanz durch ein Kontinuum unterschiedlich energiereicher chemischer Bindungen charakterisiert ist, deren Stärke letztlich die biologische Verwertbarkeit der organischen Stoffe be-

stimmt. Aufgrund dieser Problematik wird die polymere organische Substanz in nur zwei Kompartimente aufgeteilt, von denen das mittelschwer abbaubare labile Kompartiment (C_d , N_d) zur Aufnahme von Ernteresiduen dient und das langsam abbaubare stabile Kompartiment (C_h , N_h) den Hauptanteil der organischen humosen Substanz des Bodens darstellt. Durch die Größe und chemische Stabilität dieses Humuspools wird das Überdauern der lebendigen Anteile des Systems über längere Zeiträume gewährleistet. Im folgenden Kapitel wird die Dynamik der drei Komponenten der organischen Substanz des Bodens, nach C- und N-Anteil getrennt, dargestellt.

2.3.1 Umsatz der organischen C-Komponenten

Das Modell enthält drei organische C-Pools, die die gesamte organische C-Substanz des Bodens abdecken: eine wasserlösliche, mikrobiell direkt verwertbare C-Quelle (C_s), eine labile mittelschnell abbaubare C-Quelle (C_d) sowie eine stabile, nur sehr langsam abbaubare C-Quelle (C_h). Der Abbau aller drei Kohlenstoffklassen wird mit Hilfe von Michaelis-Menten-Kinetiken beschrieben (MICHAELIS & MENTEN, 1913). Allerdings wird nur der lösliche Kohlenstoff C_s mikrobiell direkt verwertet. Für die beiden anderen Substanzklassen C_d und C_h wird angenommen, dass sie außerhalb der mikrobiellen Zellen, d.h. durch Exoenzyme schrittweise zum wasserlöslichen C-Substrat C_s abgebaut werden müssen und erst dann in die Zelle aufgenommen werden können. Dieser Annahme liegt die Beobachtung zugrunde, dass organische N-Verbindungen ebenfalls erst zellextern bis zum Ammonium, also einem sehr kleinen Molekül, abgebaut werden, bevor sie ins Zellinnere gelangen (MOLINA et al., 1990).

Umsatzrate des wasserlöslichen Pools C_s

Bei der C_s -Verwertung werden der Substanzverbrauch für die Synthese der mikrobiellen Zellbiomasse sowie Wachstums- und Erhaltungsaerum der Mikroorganismen in Abhängigkeit von der Biomassekonzentration C_b und der mikrobiellen Aktivität r berücksichtigt (zusammen gefasst im 1. Term von Gleichung 35):

$$\frac{dC_s}{dt} = - \left(\frac{\mu(C_s)}{Y_{C_s}} + mn_{C_s} \right) \cdot r \cdot C_b + r \cdot C_b \cdot (\eta(C_d) + \eta(C_h) \cdot f_{hC_s}) + Q_s \quad (35)$$

mit:

| | | |
|--------------|--|--|
| Q_s : | externer Quellenterm (Pflanzenresiduen u.a.) | [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ Tag ⁻¹] |
| Y_{C_s} : | mikrobielle Nutzungseffizienz des Substrates C_s | [-] |
| mn_{C_s} : | mikrobieller Erhaltungsumsatz auf C_s | [Tag ⁻¹] |

Die C_s -Neubildung erfolgt in erster Linie durch den mikrobiellen Abbau des labilen organischen Pools C_d . Die Abbaurate $\eta(C_d)$ (2. Term von Gleichung 35) ist in Form einer Michaelis-Menten-Kinetik formuliert:

$$\eta(C_d) = \frac{\eta C d_{\max} \cdot C_d}{K_{Cd} + C_d} \quad (36)$$

mit

| | | |
|---------------------|---|--|
| $\eta C d_{\max}$: | maximale Abbaurate für den C-Pool C_d | [Tag ⁻¹] |
| K_{Cd} : | Michaelis-Menten-Konstante für C_d | [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] |

Als weitere Quelle für löslichen organischen Kohlenstoff (C_s) steht der Humus-Pool (C_h) zur Verfügung. Bei seinem Abbau geht der Anteil f_{hCs} direkt in den C_s -Pool über. Die Abbaurate $\eta(C_h)$ im 3. Term von Gleichung 35 ist definiert als:

$$\eta(C_h) = \frac{\eta C h_{\max} \cdot C_h}{K_{Ch} + C_h} \quad (37)$$

mit

| | | |
|---------------------|---|--|
| $\eta C h_{\max}$: | maximale Abbaurate für den Humus-C-Pool | [Tag ⁻¹] |
| K_{Ch} : | Michaelis-Menten-Konstante für C_h | [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] |

Im Quellterm Q_s in Gleichung 35 sind außerdem drei weitere C_s -Quellen zusammengefasst, deren Flussraten durch das in SIMULAT integrierte Pflanzenmodul sowie das Stofftransportmodell vorgegeben sind (Beschreibung in Kapitel 4):

1. *Während der Vegetationsperiode* stellen abgestorbene Wurzelbiomasse und Wurzelausscheidungen des Pflanzenbewuchses, wie z.B. Exsudate und Mucilage, eine kontinuierliche Quelle für lösliche organische Substanz (C_s) dar. Beide Arten der C_s -Zufuhr werden über einen Abbauterm erster Ordnung im Wurzelwachstumsteil des Pflanzenmodells zusammen gefasst. Je nach Wurzeldichte in einem Bodenkompartment von 10 cm Stärke gelangt eine gewisse Menge an Biomasse (in kg Trockenmasse) in die betrachtete Tiefenstufe. Die Trockenmasse wird umgerechnet in C- bzw. N-Einheiten und auf die Stoffkompartimente von SIMULAT-NC verteilt. Es wird vereinfachend angenommen, dass es sich bei der absterbenden Wurzelbiomasse hauptsächlich um Haarwurzeln handelt, die vollständig in den C_s -Pool überführt werden können, da der Anteil strukturbildender Elemente, wie z.B. Zellwandmaterial, gering ist. Der N-Anteil der absterbenden Wurzelbiomasse und Exsudate fließt direkt in den NH_4^+ -Pool.
2. *Nach jeder Ernte* fließt ein, je nach Fruchtart, variierender Anteil der Ernterückstände sowie ein Teil der im Boden verbliebenen Wurzelbiomasse in den C_s -Pool. Die polymeren wasserunlöslichen Bestandteile der Ernterückstände werden in den C_d - bzw. N_d -Pool überführt. Die Wurzelbiomasse wird dabei proportional zur Wurzeldichte in einer Bodenschicht über die gesamte Durchwurzelungstiefe verteilt. Die oberirdischen Ernterückstände, wie z.B. Stoppeln werden vom SIMULAT-Pflanzenmodell in die oberste Bodenschicht (0-10 cm) in SIMULAT-NC überführt.

3. *Mit dem Fluss des Bodenwassers* zwischen den betrachteten Bodenschichten kann wasserlösliche organische Substanz (C_s) in tiefere Bodenschichten verlagert werden.

Umsatzrate des labilen organischen Pools C_d

Der labile und relativ zu den anderen organischen Pools mittelschnell abbaubare Kohlenstoffpool (C_d) dient im Modell in erster Linie zur Aufnahme der nichtlöslichen C-Bestandteile der Ernteresiduen. Aber auch ohne Biomassezufuhr von außen wird er ständig neu gebildet und abgebaut. In SIMULAT-NC sind, abgesehen von der Zufuhr an organischer Substanz über das Pflanzenmodul, vier Flüsse am Ab- und Aufbau des Pools beteiligt.

Es wird zwischen zwei C_d -Quellen unterschieden: (1) fließt die Fraktion f_{Cd} der abgestorbenen und lysierten mikrobiellen Biomasse in den C_d -Pool (1. Term Gleichung 38); (2) geht beim mikrobiellen Abbau des Humuspools C_h der Anteil $(1-f_{hCs})$ des Abbauproduktes in den C_d -Pool über (2. Term Gleichung 38). Da sowohl die mikrobielle Sterberate als auch der Humusabbau proportional zu Konzentration und Aktivität der Mikroorganismen formuliert sind, werden beide Terme mit $r \cdot C_b$ multipliziert:

$$\frac{dC_d}{dt} = r \cdot C_b \cdot (\alpha(C_b) \cdot f_{Cd} + \eta(C_h) \cdot (1 - f_{hCs}) - \eta(C_d)) - k_{hum} \cdot R(T) \cdot C_d + Q_d \quad (38)$$

mit

| | | |
|-------------|--|--|
| k_{hum} : | maximale Humifizierungsrate des C_d -Pools | [Tag ⁻¹] |
| Q_d : | externe Quelle (Pflanzen- und Wurzelreste) | [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹ Tag ⁻¹] |

Der Abbau der organischen C_d -Fraktion erfolgt in erster Linie durch die Mikroorganismen. Hier bestimmen die Mikroorganismenkonzentration C_b und ihre Aktivität r sowie die C_d -Konzentration selber die Geschwindigkeit des Prozesses (3. Term Gleichung 38). Der C_d -Pool ist außerdem Ausgangssubstanz für die Humusbildung. So trägt die abiotische Polymerisierung der Lignine zu Huminstoffen zur Verringerung der C_d -Konzentration bei. Es kann aber der gesamte C_d -Pool, ohne Aufteilung in Lignin- und Nicht-Lignin-Fraktion, in diesen Prozess einbezogen werden, da nach ZIECHMANN (1994) und FOOKEN (1999) auch Cellulosen durch Umwandlung in Polyphenole und Chinone und anschließende Polymerisierung an der Humusbildung beteiligt sind. Da die Polymerisierung ohne direkte Beteiligung der mikrobiellen Biomasse abläuft, wird die Rate der Humusbildung über eine Kinetik 1. Ordnung und nur in Abhängigkeit von der C_d -Konzentration und der Temperatur formuliert (4. Term in Gleichung 38).

Der Quellterm Q_d repräsentiert den Zufluss an Ernteresiduen in den C_d -Pool. Zum Zeitpunkt der Ernte wird der polymere C-Anteil der oberirdischen Pflanzenteile in den C_d -Pool der obersten Bodenschicht (0-10cm) überführt. Der polymere Anteil der Wurzelbiomasse wird unter Berücksichtigung der zum Zeitpunkt der Ernte vorliegenden Durchwurzelungsdichte über die gesamte Durchwurzelungstiefe der Pflanze verteilt.

Umsatzrate des stabilen organischen Pools C_h

Aus den bisher beschriebenen Modellgleichungen ergibt sich die Konzentrationsänderung des Humuspools (C_h) aus der Geschwindigkeit des mikrobiellen Abbaus der Humussubstanz sowie der Humifizierungsrate des labilen organischen Pools (C_d):

$$\frac{dC_h}{dt} = k_{hum} \cdot R(T) \cdot C_d - \eta(C_h) \cdot r \cdot C_b \quad (39)$$

Der mikrobiell abgebaute Humus-C-Anteil fließt sowohl dem löslichen C-Pool C_s (Anteil f_{hCs}) als auch dem labilen C-Pool C_d zu (Anteil $1-f_{hCs}$). Diese Annahme erscheint gerechtfertigt, da Humus sowohl aus schwerer verwertbaren, zum Teil aromatisch stabilisierten Komponenten, aber auch aus kurzen und reaktiven Seitenketten besteht, die durch enzymatische Abspaltung wasserlöslich und damit teilweise mikrobiell verwertbar gemacht werden können.

CO₂-Emissionen

Die CO₂-Emissionen des Bodens spiegeln bei Abwesenheit von Pflanzen und Kleinstlebewesen den Energiebedarf der Mikroorganismenpopulation wider. Das Ausmaß dieses Energieverbrauchs wird durch zwei Prozesse bestimmt:

1. das mikrobielle Wachstum, wobei hier sowohl der messbare Zuwachs an Biomasse auf dem löslichen organischen Substrat, aber auch das sogenannte kryptische (= verborgene) Wachstum auf der abgestorbenen mikrobiellen Biomasse eine Rolle spielt. Außerdem
2. die Erhaltungsatmung, für die der Energieverbrauch berücksichtigt wird, der unabhängig von Wachstumsprozessen gedeckt werden muss. Hier sind die Aufrechterhaltung von Ionengradienten, Nährstofftransporte durch die mikrobielle Zellwand oder Reparaturvorgänge zu nennen. Dieser Energiebedarf spielt nach PIRT (1965) für die C-Bilanz insbesondere in Situationen mit Mangel an C-Substrat, wie sie in mitteleuropäischen Agrarböden bei fehlendem Pflanzenbewuchs herrschen können, eine wichtige Rolle.

In SIMULAT-NC wird die Rate der CO₂-Entwicklung wie folgt abgebildet:

$$\frac{dCO_2}{dt} = \left(\frac{\mu(C_s) \cdot (1 - Y_{Cs})}{Y_{Cs}} + mn_{Cs} \right) \cdot r \cdot C_b + \alpha(C_b) \cdot r \cdot C_b \cdot (1 - f_{Cd}) \cdot (1 - Y_{Cs}) \quad (40)$$

Mit dem ersten Term werden Wachstums- und Erhaltungsatmung auf dem löslichen C-Substrat C_s als Funktion der mikrobiellen Aktivität und Dichte beschrieben. Der erste Term in der Klammer gibt den C_s -Gesamtverbrauch der Mikroorganismen abzüglich des Anteils wider, der für die Synthese mikrobieller Biomasse verbraucht wird. Der Erhaltungsumsatz mn_{Cs} wird durch Multiplikation mit der Aktivität r variabel und abhängig vom Aktivitätszustand der Mikroorganismen bzw. der Substratversorgung formuliert, wie von LETTAU & KUZYLAKOV (1999) und KNAPP et al. (1983) beschrieben. Das heißt, es wird davon ausgegangen,

dass der Erhaltungsbedarf der dormanten Mikroorganismenfraktion vernachlässigbar ist. Der zweite Term der Gleichung beschreibt die Wachstumsatmung auf dem Kohlenstoffsubstrat, das durch Lysis der abgestorbenen mikrobiellen Biomasse zur Verfügung steht.

2.3.2 Umsatz der organischen N-Komponenten

Das komplexe Wechselspiel von Stickstoffmineralisierung und -immobilisierung ist der grundlegende Prozess des Stickstoffzyklus in landwirtschaftlich genutzten Böden. Er bestimmt die N-Verfügbarkeit für den Pflanzenbestand und beeinflusst damit die Höhe der Ernteerträge. Die mikrobielle Biomasse des Bodens nimmt einerseits die Rolle eines Konkurrenten um den mineralischen Stickstoff im Boden ein, stellt aber andererseits durch Mineralisierung der organischen Bodensubstanz Stickstoff bereit, der auch für den Pflanzenbestand verfügbar ist. Im folgenden Abschnitt wird die Neubildung und Mineralisierung des Stickstoffanteils der organischen Bodensubstanz beschrieben. Da C und N in der organischen Substanz eng gekoppelt sind, gibt es, ähnlich wie im C-Modell einen mittelschnell abbaubaren labilen Pool (N_d) sowie einen langsam abbaubaren Speicherpool (N_h). Das Pendant zum wasserlöslichen C_s -Pools als mikrobiell direkt verwertbares Substrat stellt im N-Modell von SIMULAT-NC der NH_4^+ -Pool dar.

Umwandlung des labilen Pools N_d

Die labile Fraktion N_d dient hauptsächlich zur Aufnahme des N-Anteils der Ernteresiduen. Es werden zwei Abbauewege für das Modellkompartiment N_d berücksichtigt (siehe Gleichung 41):

1. Der Hauptabbaupfad dieser Fraktion verläuft über die Mikroorganismenpopulation, die den organischen Stickstoff in einem Schritt bis zum Ammonium abbaut. Dieser Pfad ist in Form der Abbaufunktion $r \cdot C_b \cdot \eta(C_d)$ durch Multiplikation mit dem N/C-Verhältnis der labilen organischen Fraktion realisiert (2. Term in Gleichung 41). Es werden dieselben Abbauraten verwendet wie für den Abbau des C-Anteils.
2. Ein weiterer Abbaueweg trägt über die Rate k_{hum} , analog zum C_d -Pool, über die Polymerisierung zur Humusbildung bei (vorletzter Term in Gleichung 41).

$$\frac{dN_d}{dt} = r \cdot C_b \cdot \left(\eta(C_h) \cdot \frac{N_h}{C_h} \cdot (1 - f_{hCs}) - \eta(C_d) \cdot \frac{N_d}{C_d} \right) + \alpha(C_b) \cdot f_{Cd} \cdot r \cdot N_b - k_{hum} \cdot R(T) \cdot N_d + Q_{Nd} \quad (41)$$

Als Quelle für den labilen organischen N-Pool (N_d) dienen drei Kompartimente:

1. Der N-Anteil der strukturbildenden Elemente der abgestorbenen mikrobiellen Biomasse fließt dem Modellkompartiment N_d zu. Er ist proportional zur Konzentration an mikrobiellem N, der dichteabhängigen Sterberate $\alpha(C_b)$ und der mikrobiellen Aktivität r .
2. Der Anteil $(1 - f_{hCs})$ der mikrobiellen Abbauprodukte des Humuspools N_h fließt dem Pool N_d zu.

3. Über den Quellterm Q_{Nd} erfolgt ein Zufluss an organischem N aus den Ernteresiduen. Nach der Ernte fließt der N-Anteil der oberirdischen Pflanzenresiduen in die oberste Bodenschicht (0-10 cm). Weiterhin wird der polymere N-Anteil der Wurzelbiomasse mit Hilfe der für den Erntezeitpunkt berechneten Durchwurzelungsdichte über alle Bodenschichten verteilt, die zum Zeitpunkt der Ernte durchwurzelt sind.

Umsatzrate des stabilen organischen N-Pools N_h

Die Neubildungs- und Zersetzungsrate des N-Anteils der Humusfraktion (N_h) ist entsprechend dem C-Anteil formuliert:

$$\frac{dN_h}{dt} = -\eta(C_h) \cdot r \cdot C_b \cdot \frac{N_h}{C_h} + k_{hum} \cdot R(T) \cdot N_d \quad (42)$$

Der N-Anteil der Humusfraktion wird, wie der C-Anteil, mikrobiell abgebaut. Eine Nachlieferung an humosem Stickstoff geschieht über die Polymerisierung der N-Komponente N_d der labilen organischen Fraktion. Die Geschwindigkeit dieses Prozesse wird über die Temperatur und die N_d -Konzentration des Bodens geregelt.

2.4 Dynamik der anorganischen N-Komponenten

Die anorganischen Stickstoffverbindungen im Boden unterliegen, anders als das wichtigste Mineralisierungsprodukt des Kohlenstoffzyklus CO_2 , einer Vielzahl von Umwandlungen, die zum Teil erwünscht sind, zum Teil aber auch unerwünschte Auswirkungen haben. So spielen die Stickstoffverluste durch Denitrifikation, d.h. vor allem die Bildung von Distickstoffoxid (N_2O) und molekularem Stickstoff (N_2) sowie die Nitratauswaschung unter dem Gesichtspunkt der Umweltbelastung eine wichtige Rolle.

Im Modell werden die Konzentrationen und Flussraten der anorganischen Verbindungen NH_4^+ , NO_3^- , NO_2^- , N_2O und N_2 abgebildet (siehe Abbildung 8). Als Prozesse werden die Nitrifikation sowie zwei Wege der Denitrifikation (heterotroph und autotroph) berücksichtigt. Die Nitratverlagerung sowie die N_{\min} -Aufnahme der Pflanze werden durch Kopplung mit dem Stofftransport- bzw. Pflanzenmodell von SIMULAT berechnet (in Abbildung 8 grau hinterlegt).

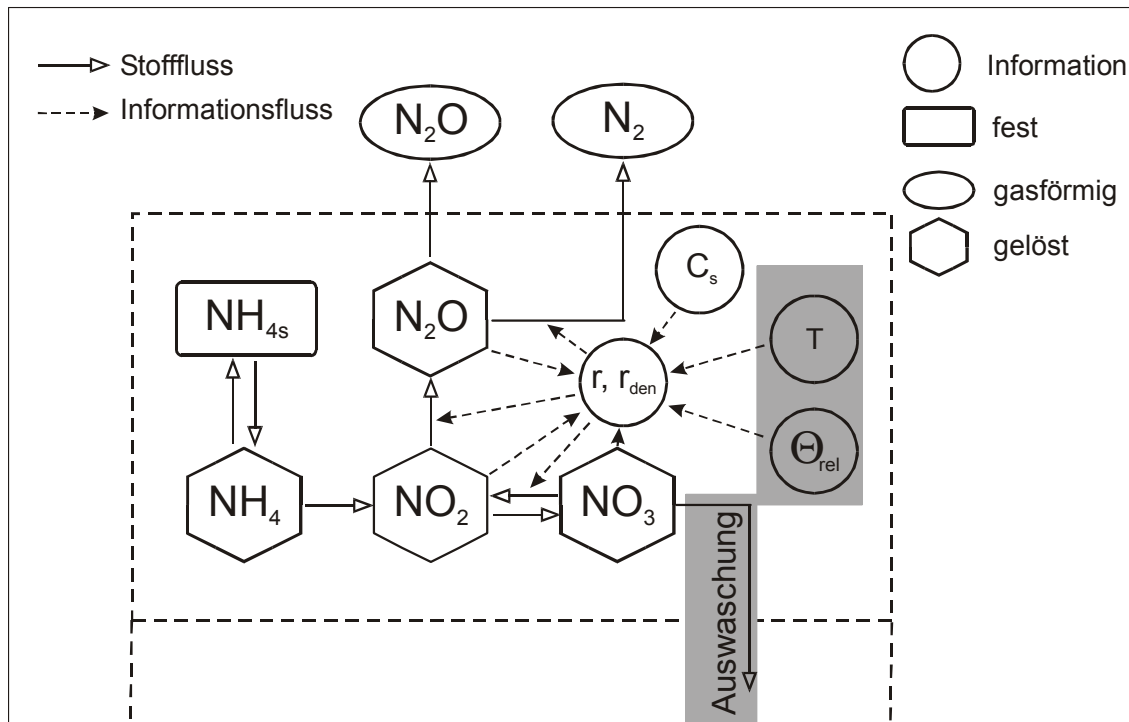


Abbildung 8 Flüsse zwischen den anorganischen Stickstoffkomponenten des Modells.

2.4.1 Nitrifikation und Denitrifikation

Nitrifikation und Denitrifikation sind die Prozesse, die eine Umwandlung und energetische Nutzung der wichtigsten anorganischen N-Verbindungen im Boden gewährleisten. Die Nitrifikation bietet den Nitrifikantenpopulationen im Boden NH_4^+ (und NO_2^-) als Energiequelle und sorgt gleichzeitig für die Bereitstellung des leichter pflanzenverfügbaren, aber auswaschbaren NO_3^- . Die Denitrifikation erlaubt eine fortgesetzte Mineralisierungstätigkeit und ein Überdauern der Mikroorganismen des Bodens auch unter anaeroben Zuständen. Da beide Prozesse im Modell über gemeinsame Zwischenprodukte miteinander verknüpft sind, werden sie hier in einem Kapitel behandelt.

Die Nitrifikation wird im folgenden Abschnitt behandelt. Die Denitrifikation, d.h. die Bildung von N_2O und N_2 , wird auf zweierlei Weisen modelliert, die sich dadurch unterscheiden, wie der Zustand des Sauerstoffmangels abgeleitet wird: Zunächst wird der Modellteil beschrieben bei dem die Überschreitung eines Grenzwertes beim relativen Wassergehalt zum anaeroben Zustand und damit zum Einsetzen der Denitrifikation führt („heterotrophe Denitrifikation“). Zum Abschluss dieses Kapitels wird der Modellteil beschrieben, bei dem davon ausgegangen wird, dass eine starke Nitrifikationstätigkeit zu anaeroben Mikrosites und damit zur N_2O -Bildung durch Teile der Nitrifikantenpopulation führt („autotrophe Denitrifikation“).

2.4.1.1 Nitrifikation

Im Nitrifikationsmodell wird NH_4^+ in Abhängigkeit von der mittleren Tagestemperatur einer Bodenschicht, vom relativen Bodenwassergehalt und der NH_4^+ -Konzentration über die Zwi-

schenverbindung NO_2^- in NO_3^- umgewandelt. Die Umwandlungsraten $\eta_{nit1}(\text{NH}_4)$ und $\eta_{nit2}(\text{NO}_2)$ sind als Sättigungsfunktionen nach Michaelis-Menten formuliert. Der erste Reaktionsschritt, d.h. die Oxidation von NH_4^+ zu NO_2^- , ist in Gleichung 43 beschrieben, sowie die Weiterreaktion von NO_2^- zu NO_3^- in Gleichung 44:

$$\eta_{nit1}(\text{NH}_4) = \frac{\mu_{n1\max} \cdot R(T) \cdot R(\Theta_{rel}) \cdot \text{NH}_4}{K_{N1} + \text{NH}_4} \quad (43)$$

und

$$\eta_{nit2}(\text{NO}_2) = \frac{\mu_{n2\max} \cdot R(T) \cdot R(\Theta_{rel}) \cdot \text{NO}_2}{K_{N2} + \text{NO}_2} \quad (44)$$

mit

| | | |
|------------------|---|--|
| $\mu_{n1\max}$: | maximale Nitrifikationsrate für NH_4^+ | $[\text{Tag}^{-1}]$ |
| K_{N1} : | Halbsättigungskonstante für 1. Nitrif.-Schritt | $[\text{kg ha}^{-1} \text{ 10 cm}^{-1}]$ |
| $\mu_{n2\max}$: | maximale Nitrifikationsrate für NO_2^- | $[\text{Tag}^{-1}]$ |
| K_{N2} : | Halbsättigungskonstante für 2. Nitrif.-Schritt | $[\text{kg ha}^{-1} \text{ 10 cm}^{-1}]$ |

Die Nitrifikation ist damit der einzige mikrobielle Prozess im N-Modell, der ohne explizite Berücksichtigung der Konzentration an mikrobieller Biomasse und ihrer Aktivität formuliert wird. Der Grund hierfür ist, dass der Biomasseanteil der Nitrifikantenpopulationen an der Gesamtbiomassepopulation sehr klein ist und sie im Verhältnis zum N-Umsatz pro Zeiteinheit sehr langsam wächst. So brauchen *Nitrosomonas*-Spezies zur Assimilation von einem Mol CO_2 35-70 Mol NH_4^+ , d.h. um ein kg $\text{CO}_2\text{-C}$ in Biomasse-C umzuwandeln, müssen 40-80 kg $\text{NH}_4^+\text{-N}$ zu NO_2^- oxidiert werden. *Nitrobacter*-Spezies benötigen sogar zwischen 70 und 100 Mol NO_2^- (BECK, 1979), um ein Mol CO_2 zu binden. GRANT (1994) benutzt in seinem Nitrifikationsmodell für die Nitrifikantenpopulation einen Anfangswert von umgerechnet 0,0045 kg Trockenbiomasse pro ha und 10 cm Schicht. Diese Population wächst bei Zugabe von 75 kg $\text{NH}_4\text{-N}$ auf ca. 1,5 kg Biomasse pro ha an und braucht dafür 16 Tage. Aufgrund der geringen Änderung der Biomassekonzentration pro Zeitschritt, die, absolut gesehen, in der Größenordnung der Messunsicherheit liegt, wird die Nitrifikantenkonzentration als konstant angenommen und jeweils in die maximale Nitrifikationsrate einbezogen.

Es wird außerdem angenommen, dass CO_2 als C-Substrat für die Nitrifikanten ausreichend zur Verfügung steht, d.h. nie limitierend auf die Umwandlung von NH_4^+ zu NO_3^- wirkt, da unter aeroben Bedingungen im Boden immer energiezehrende Stoffwechselprozesse von Mikroorganismen und/oder Pflanzen ablaufen, bei denen CO_2 produziert wird.

Eine Erhöhung des pH-Wertes, wie sie z.B. nach der Ausbringung von Wirtschaftsdüngern

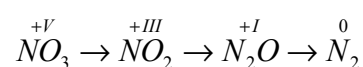
auftreten kann, führt zu einer vermehrten Ammoniakfreisetzung. Diese ist nach SMITH et al. (1997) unter aeroben Bedingungen der Hauptgrund für eine Akkumulation von NO_2^- im Boden, da freier Ammoniak zu einer Inhibierung des zweiten Schrittes der Nitrifikation, der NO_2^- Oxidation, führt. Bei Inkubationsversuchen haben BURNS et al. (1996) NH_4^+ -Mengen als Harnstoff appliziert, die typisch sind für die Bedingungen unter denen das Modell eingesetzt werden soll. Es wurde eine pH-abhängige NO_2^- -Anreicherung gemessen, die maximal ein 1/1000 der NH_4^+ -Konzentration betrug. Es wird daher davon ausgegangen, dass der pH-Einfluss auf die Nitrifikation unter den Bewirtschaftungsbedingungen, für die das Modell getestet wird, vernachlässigbar ist.

Die Abhängigkeit der Nitrifikation von Temperatur und Wassergehalt wird simuliert, indem die maximalen Umsatzraten μ_{n1max} und μ_{n2max} mit Reduktionsfunktionen für Temperatur und Wassergehalt multipliziert werden. Es werden die Funktionen $R(T)$ und $R(\Theta_{rel})$ eingesetzt, die auch die Aktivität der aerob wachsenden Mikroorganismen steuern. Das heißt, es wird angenommen, dass der Sauerstoffgehalt im Boden indirekt über den Bodenwassergehalt abgeschätzt werden kann. Bei einem relativen Wassergehalt von $\Theta_{rel} > 0,61$ kommen beide Nitrifikationsschritte aufgrund von Sauerstoffmangel zum Erliegen.

2.4.1.2 Heterotrophe Denitrifikation

Das Modell für die heterotrophe Denitrifikation beschreibt die Stickstoff- und Kohlenstoffumsätze desjenigen Anteils der Mikroorganismenpopulation, der in der Lage ist, unter anaeroben Bedingungen Stickoxide und organische C-Verbindungen für Energiegewinnung und Biomasseaufbau einzusetzen. Die Aktivität dieses Anteils der Mikroorganismenpopulation wird durch eine eigene Aktivitätsfunktion r_{den} beschrieben (siehe Kapitel 2.2.1.2). Über die Zustandsvariable r_{den} werden alle denitrifikatorischen Prozesse von Temperatur und Wassergehalt sowie der Konzentration an löslichen organischen C-Verbindungen (C_s) und Stickoxiden in der betrachteten Bodenschicht abhängig gemacht. Das Denitrifikationsmodell wird aktiviert, sobald der relative Wassergehalt Θ_{rel} einen Wert von 0,61 überschreitet. In diesem Fall werden sämtliche Umsatzprozesse der organischen Substanz mit dem Aktivitätsfaktor r_{den} multipliziert. Die Modellgleichungen für den Abbau der organischen Bodensubstanz (C- und N-Anteil) bleiben ansonsten unverändert, so dass hier auf eine weitere Beschreibung der Umsätze unter anaeroben Bedingungen verzichtet werden kann.

Im Denitrifikationsmodell von SIMULAT-NC wird NO_3^- mit Stickstoff der Oxidationsstufe +5 schrittweise über NO_2^- und N_2O zu N_2 mit der Oxidationsstufe 0 reduziert:



In Anlehnung an einen Modellansatz von LEFFELAAR & WESSEL (1988) wird sowohl die dissimilatorische als auch die assimilatorische Verwertung von NO_3^- , NO_2^- und N_2O berücksichtigt. Die Zwischenstufe NO wird nicht berücksichtigt. Die Modellgleichungen für die Re-

duktion der Stickoxide ähneln daher denen für die mikrobielle Verwertung der löslichen Kohlenstofffraktion (C_s) (siehe Gleichung 35). Als Endprodukt der dissimilatorischen Verwertung wird molekularer Stickstoff (N_2) gebildet, der als wasserunlösliches Gas vollständig in die Atmosphäre entweicht. Allgemein lässt sich die Rate für den mikrobiellen Gesamtverbrauch für jedes der einzelnen Stickoxide wie folgt formulieren:

$$\eta(NO_x) = - \left(\frac{\mu(NO_x)}{Y_{NO_x}} + mn_{NO_x} \cdot \frac{NO_x}{SumNO_x} \right) \cdot r_{den} \cdot C_b \quad (45)$$

mit

| | | |
|---------------|---|--|
| NO_x : | Konzentration NO_3^- -N, NO_2^- -N bzw. N_2O -N | [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] |
| mn_{NO_x} : | NO_x -Bedarf für Erhaltungsumsatz | [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] |
| Y_{NO_x} : | Wachstumsausbeute der Denitrifikanten auf NO_x | [-] |
| $SumNO_x$: | Gesamtkonzentration NO_3^- -N, NO_2^- -N, N_2O -N | [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] |

und der Wachstumsrate $\mu(NO_x)$ der Denitrifikanten auf NO_x , die in Form einer Michaelis-Menten-Kinetik formuliert ist:

$$\mu(NO_x) = \frac{\mu NO_{x_{max}} \cdot NO_x}{K_{NO_x} + NO_x} \quad (46)$$

mit

| | | |
|----------------------|---|--|
| $\mu NO_{x_{max}}$: | maximale Wachstumsrate der Denitrifikanten auf NO_x | [Tag ⁻¹] |
| K_{NO_x} : | Michaelis-Menten-Konstante für NO_x | [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] |

Im Gegensatz zum aeroben Modellteil wird die N-Aufnahme nicht durch ein maximales N/C-Verhältnis der Mikroorganismen begrenzt. Auf diese Formulierung wurde verzichtet, da über die Variabilität der C/N-Verhältnisse der Denitrifikantenpopulation in der Literatur keine Angaben zu finden sind.

Die Geschwindigkeit der anaeroben Nitratreduktion ist abhängig vom mikrobiellen Wachstum auf NO_3^- ($\mu(NO_3)$), der mikrobiellen Veratmung von NO_3^- sowie dem Erhaltungsenergieumsatz mn_{NO_3} . Der NO_3^- -Verbrauch durch den Bedarf an Erhaltungsenergie ist nicht als festgesetzter Bedarf pro Masseneinheit mikrobieller Biomasse formuliert, wie für den löslichen Kohlenstoff C_s , sondern nach LEFFELAAR et al. (1988) proportional zum NO_3^- -Anteil an der Gesamtmenge der verwertbaren Stickstoffoxide $SumNO_x$, da die Mikroorganismen ihren Erhaltungsenergiebedarf über alle drei verfügbaren Stickstoffoxide NO_3^- , NO_2^- und N_2O decken können:

$$\frac{dNO_3}{dt} = -\eta(NO_3) \pm Q_{NO_3} = -\left(\frac{\mu(NO_3)}{Y_{NO_3}} + mn_{NO_3} \cdot \frac{NO_3}{SumNO_x} \right) \cdot r_{den} \cdot C_b \pm Q_{NO_3} \quad (47)$$

Im Term Q_{NO_3} in Gleichung 47 ist die Nitratmenge zusammengefasst, die pro Zeitschritt durch Transport mit dem Bodenwasser zu einer Bodenschicht hinzukommt oder verloren geht, sowie die Menge, die durch Düngerapplikation zusätzlich in die oberste Bodenschicht gelangt.

Die reaktive Zwischenverbindung Nitrit (NO_2^-) wird als erstes Produkt der Nitratveratmung gebildet. Seine Bildungsrate wird daher formuliert über den mikrobiellen Gesamtverbrauch an NO_3^- ($\eta(NO_3)$) vermindert um den Anteil ($\mu(NO_3) \cdot r_{den} \cdot C_b$), der für den Biomasse-N-Aufbau verbraucht wird:

$$\frac{dNO_2}{dt} = \eta(NO_3) - \mu(NO_3) \cdot r_{den} \cdot C_b - \eta(NO_2) \quad (48)$$

Die Nitritverwertung erfolgt analog zur Nitratverwertung durch Veratmung und Aufbau von Biomasse-N; beide Prozesse sind in Gleichung 48 zusammengefasst im Term $\eta(NO_2)$, der wiederum analog formuliert ist zum Term $\eta(NO_3)$ (siehe Gleichung 47) und daher hier nicht noch einmal aufgeschlüsselt ist.

Die Umsatzrate für N_2O ergibt sich aus dem veratmeten NO_2^- vermindert um den N_2O -Verbrauch für Atmung und Biomasse-N-Aufbau ($\eta(N_2O)$):

$$\frac{dN_2O}{dt} = \eta(NO_2) - \mu(NO_2) \cdot r_{den} \cdot C_b - \eta(N_2O) \quad (49)$$

mit:

$$\mu(NO_2): \text{ mikrobielle Wachstumsrate auf } NO_2 \quad [kg \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1} \text{ Tag}^{-1}]$$

Die N_2 -Bildung erfolgt entsprechend als Produkt der N_2O -Veratmung und stellt gleichzeitig das Endprodukt der heterotrophen Denitrifikation dar:

$$\frac{dN_2}{dt} = \eta(N_2O) - \mu(N_2O) \cdot r_{den} \cdot C_b \quad (50)$$

mit:

$$\mu(N_2O): \text{ mikrobielle Wachstumsrate auf } N_2O \quad [kg \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1} \text{ Tag}^{-1}]$$

Die Umsatzrate des N-Anteils der Mikroorganismenpopulation unter anaeroben Bedingungen

wird beschrieben über das Wachstum auf NH_4^+ , NO_3^- , NO_2^- und N_2O (1. Term Gleichung 51) verringert um einen Sterbeterm $\alpha(C_b) \cdot r_{den} \cdot N_b$ und den wiederverwerteten N-Anteil der abgestorbenen mikrobiellen Biomasse (N_{rec}):

$$\frac{dN_b}{dt} = r_{den} \cdot C_b \cdot (\mu(NH_4) + \mu(NO_3) + \mu(NO_2) + \mu(N_2O)) - \alpha(C_b) \cdot r_{den} \cdot N_b + N_{rec} \quad (51)$$

Der Term N_{rec} beinhaltet, wie auch im aeroben Modellteil, den in die lebende Biomasse rücküberführten N-Anteil der abgestorbenen und lysierten mikrobiellen Biomasse (siehe Gleichung 34).

2.4.1.3 Autotrophe Denitrifikation

Beim Modell für die autotrophe Denitrifikation wird davon ausgegangen, dass nicht ein erhöhter Wassergehalt, sondern starke Mineralisierungs- und Nitrifikationstätigkeit zu anaeroben Zonen im Boden führt (siehe z.B. WOLF & RUSSOW, 2000). Außerdem wird angenommen, dass es im Wesentlichen die Nitrifikantenpopulationen sind, die bei reduzierter O_2 -Verfügbarkeit NO_2^- als Elektronenakzeptor nutzen und zu N_2O reduzieren (SCHLEGEL, 1992). So können nach WRAGE et al. (2001) autotrophe Nitrifizierer für bis zu 30 % des jährlich gebildeten N_2O verantwortlich sein.

Im Modell wird die Rate der autotrophen N_2O -Entwicklung $\eta_{nit}(N_2O)$ mit einer Kinetik 1.Ordnung in Abhängigkeit von der NO_2^- -Konzentration im Boden, der Bodentemperatur und dem Bodenwassergehalt berechnet:

$$\eta_{nit}(N_2O) = k_{niden} \cdot R(T) \cdot R(\Theta_{rel}) \cdot NO_2 \quad (52)$$

mit

| | | |
|----------------------|----------------------------------|--|
| $\eta_{nit}(N_2O)$: | autotrophe N_2O -Bildungsrate | $[kg\ ha^{-1}\ 10\ cm^{-1}\ Tag^{-1}]$ |
| k_{niden} : | maximale Umsatzrate für NO_2^- | $[Tag^{-1}]$ |

Als witterungsbedingte Reduktionsfaktoren dienen die Funktionen $R(T)$ und $R(\Theta_{rel})$, die bereits in Kapitel 2.2.1.1 beschrieben wurden.

Im Unterschied zur heterotrophen Denitrifikation erfolgt bei der autotrophen Denitrifikation in SIMULAT-NC keine weitere Reduktion von N_2O zum molekularen Stickstoff N_2 . Nach FIRESTONE & DAVIDSON (1989) ist die Reduktion der Stickoxide um so vollständiger, je stärker die Diffusion durch Wasser in den Bodenporen behindert wird, d.h. je länger die Verweilzeit in der wässrigen Bodenlösung. Da die N_2O -Entwicklung im Modell an die Nitrifikation gekoppelt ist, die nur bei relativen Wassergehalten $\Theta_{rel} \leq 0,61$ abläuft, wird angenom-

men, dass N_2O aufgrund der eher geringen Wassergehalte und seiner limitierten Wasserlöslichkeit innerhalb des Zeitschrittes, in dem es gebildet wird, an die Bodenluft abgegeben wird.

2.4.2 Adsorption und Desorption von NH_4^+ in der Bodenmatrix

In ton- und schluffhaltigen Böden kann die Fixierung von Ammonium an der mineralischen Bodensubstanz großen Einfluss auf die Konzentration an mineralischem Stickstoff in der Bodenlösung haben (FEIGENBAUM et al., 1994). Es wird unterschieden zwischen einem vorübergehend an der Oberfläche von Tonmineralen gebundenen NH_4^+ und einem nativ fixierten, d.h. nicht-austauschbaren NH_4^+ . Im Modell wird nur das fixierte NH_4^+ betrachtet, das mit dem NH_4^+ der Bodenlösung im Gleichgewicht steht und von Mikroorganismen und Pflanzen verwertet werden kann. In einem Laborexperiment wurde von NIEDER et al. (1995b) ermittelt, dass die Gleichgewichtseinstellung zwischen fixiertem und gelöstem Ammonium in einem Lössboden bereits innerhalb weniger Stunden abgeschlossen sein kann. Die Rate des Sorptions- und Desorptionsvorganges hängt eher von der NH_4^+ -Zufuhr (Düngung, Mineralisierung) und dem N-Entzug durch Mikroorganismen und Pflanze ab (SOON, 1998, SCHERER & WERNER, 1996), als vom Tongehalt des Bodens. Die mineralische N-Ad- und Desorption wird daher eng an die NH_4^+ -Dynamik gekoppelt und als lineare Gleichgewichtsisotherme formuliert:

$$\frac{d\text{NH}_{4s}}{dt} = k_c \cdot \frac{d\text{NH}_4}{dt} \quad (53)$$

mit

k_c : bodenspezifischer Sorptionskoeffizient für NH_4^+ [-]

Diese Formulierung ist unter der vereinfachenden Annahme gültig, dass die Adsorptionskapazität des Bodens bei den betriebsüblich verabreichten Ammonium- sowie Kaliummengen nicht ausgelastet ist.

2.4.3 Gesamtdynamik von NO_3^- und NH_4^+

Bisher wurden nur die Teilprozesse der NO_3^- - und NH_4^+ -Dynamik dargestellt. Im folgenden Abschnitt werden daher noch einmal die Gesamtgleichungen für die zeitliche Entwicklung der NO_3^- - und NH_4^+ -Konzentration präsentiert.

NO_3^- Dynamik

Die Gesamtrate der Nitratumsetzung unter aeroben Bedingungen ergibt sich aus der Geschwindigkeit der Nitratbildung aus Nitrit (2. Schritt der Nitrifikation) und der Geschwindigkeit der mikrobiellen NO_3^- -Aufnahme als Senke:

$$\frac{dNO_3}{dt} = \eta_{mit2}(NO_2) - \mu(NO_3) \cdot r \cdot C_b \cdot (NC_{b\max} - NC_b) \pm Q_{NO3} \quad (54)$$

Außerdem bestimmen weitere Quellen und Senken (Q_{NO3}) in Form von Düngergaben, der Nitratverlagerung mit dem Bodenwasser und der Nitrataufnahme durch die Pflanze die Geschwindigkeit der Änderung der Nitratkonzentration in einer Bodenschicht.

Unter anaeroben Bedingungen, also definitionsgemäß bei einem relativen Bodenwassergehalt $\Theta_{rel} > 0,61$, ersetzt NO_3^- den Sauerstoff als Elektronenakzeptor und die Nitrifikation kommt aufgrund von Sauerstoffmangel zum Erliegen. Die NO_3^- -Dynamik unter anaeroben Bedingungen ist dann wie folgt formuliert:

$$\frac{dNO_3}{dt} = - \left(\frac{\mu(NO_3)}{Y_{NO3}} + mn_{NO3} \cdot \frac{NO_3}{SumNO_x} \right) \cdot r_{den} \cdot C_b \pm Q_{NO3} \quad (55)$$

NH_4^+ Dynamik

Die Entwicklung der NH_4^+ -Konzentration im Boden wird unter aeroben Bedingungen maßgeblich durch die Geschwindigkeit der Nitrifikation und der NH_4^+ -Immobilisierung durch die mikrobielle Biomasse bestimmt (Senkenprozesse). Als NH_4^+ -Quellen dienen die Mineralisierung aus den labilen und stabilen organischen Pools (N_d und N_h) sowie die Mineralisierung des N-Anteils der abgestorbenen mikrobiellen Biomasse (N_{rel}):

$$\frac{dNH_4}{dt} = r \cdot C_b \cdot \left(\eta(C_d) \cdot \frac{N_d}{C_d} + \eta(C_d) \cdot \frac{N_h}{C_h} \cdot f_{hCs} \right) + N_{rel} - \mu(NH_4) \cdot r \cdot C_b \cdot (NC_{b\max} - NC_b) - \eta_{mit1}(NH_4) \pm Q_{NH4} \quad (56)$$

mit:

$$N_{rel} = \alpha(C_b) \cdot r \cdot N_b \cdot (1 - f_{Cd}) \cdot \left(\frac{NC_b}{NC_{b\max}} \right) \quad (57)$$

Für anaerobe Bedingungen wird Gleichung 56 leicht modifiziert, da keine Nitrifikation stattfindet und die mikrobielle Aktivität r durch die Aktivität der Denitrifikantenpopulation r_{den} ersetzt wird:

$$\frac{dNH_4}{dt} = r_{den} \cdot C_b \cdot \left(\eta(C_d) \cdot \frac{N_d}{C_d} + \eta(C_d) \cdot \frac{N_h}{C_h} \cdot f_{hCs} \right) + N_{rel} - \mu(NH_4) \cdot r_{den} \cdot C_b \pm Q_{NH4} \quad (58)$$

Der Quellterm Q_{NH_4} repräsentiert den NH_4^+ -Zufluss über den wasserlöslichen N-Anteil der abgestorbenen Wurzelbiomasse und der Exsudate während der Vegetationsperiode sowie nach der Ernte den wasserlöslichen N-Anteil der ober- und unterirdischen Ernteresiduen.

2.5 Modellkalibrierung

2.5.1 Vorgehensweise

Die Bestimmung der Parameter von SIMULAT-NC erfolgte mit Hilfe des Programms ModelMaker Version 2.0c (SB Technology Ltd., Cherwell Scientific Publishing Ltd.). Als Optimierungsverfahren, d.h. um die Abweichung zwischen gemessenen und simulierten Werten zu minimieren, ist in ModelMaker der Marquard-Levenberg-Algorithmus implementiert (ANONYM, 1994). Als Maß für die Abweichung wird die über den Messwertfehler gewichtete Fehlerquadratsumme (Weighted Sum of Squares, X^2) verwendet:

$$X^2 = \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n \frac{(O_{ji} - P_{ji}(A))^2}{\epsilon_{ji}^2} \quad (59)$$

mit:

- O_{ji} : Messwert der Zustandsvariable j zum Zeitpunkt i
- P_{ji} : simulierter Wert bei aktuellem Parametervektor A
- ϵ_{ji} : Fehler des Messwertes
- n: Anzahl der Messwerte
- m: Anzahl der Zustandsvariablen

Bei den Messwerten, die für die Parameterbestimmung des Modells verwendet werden, ist in der Regel kein Fehler angegeben. Setzt man allerdings den Fehler $\epsilon_{ji} = 1$, so kann dies dazu führen, dass bei der großen Spannbreite von Werten, wie sie im Modell vorliegen, die großen Werte den Wert von X^2 dominieren. Um dies zu verhindern, wird für den jeweiligen Fehler ϵ_{ji} ein Wert von 10 % des Messwertes O_{ji} sowie Zufälligkeit des Fehlers, d.h. Normalverteilung, angenommen. Nach erfolgreicher Schätzung mit einem durch visuelle Anpassung ermittelten Parameteranfangswert wird der optimierte Wert noch einmal um ± 50 % variiert und eine erneute Schätzung durchgeführt, um die Sicherheit zu erhöhen, dass bei der ersten Schätzung nicht nur ein lokales Minimum berechnet wurde.

Neben der visuellen Auswertung und Interpretation wird die Qualität der Übereinstimmung zwischen gemessenen und simulierten Werten quantitativ abgeschätzt:

(1) mit Hilfe der Modelleffizienz ME nach JANSSEN & HEUBERGER (1995):

$$ME = \frac{\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2 - \sum_{i=1}^n (P_i - O_i)^2}{\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2} \quad (60)$$

mit:

\bar{O} : Mittelwert der Messdaten

Die Modelleffizienz ME bewegt sich im Bereich $-\infty$ bis 1; ihr Optimalwert liegt bei 1,0. Die Modelleffizienz ist ein Maß dafür, inwiefern die Modellvorhersage eine Verbesserung gegenüber dem Mittelwert der Messdaten darstellt. Negative Werte für ME bedeuten demnach, dass der Mittelwert der Messdaten eine bessere Vorhersage für eine Zustandsvariable liefert als die Modellsimulation;

(2) durch die Wurzel der mittleren Fehlerquadratsumme (RMSE):

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (P_i - O_i)^2}{n}} \quad (61)$$

bei der Werte in der Größenordnung der Standardabweichungen der Messwerte ein gutes Modellergebnis anzeigen und

(3) durch die Unsicherheit, d.h. den Variationskoeffizienten der geschätzten Parameter.

SIMULAT-NC beschreibt eine Reihe von Prozessen mit nichtlinearer Dynamik, die (bis auf die Nitrifikation) über die mikrobielle Aktivität und die mikrobielle Biomasse gekoppelt sind. Für die Bestimmung der Parameter eines solchen Modells wäre es ideal, wenn Zeitreihen von Messdaten für alle Zustandsgrößen des Modells verfügbar wären. Da dies nicht der Fall ist, wird das Modell in Teilprozesse untergliedert und die Parameterbestimmung erfolgt sukzessive für jeden dieser Teilprozesse. Bei diesen Teilprozessen handelt es sich um:

1. die Mineralisierungs- und Immobilisierungsprozesse und das Wachstum der Mikroorganismen,
2. die Nitrifikation,
3. die heterotrophe Denitrifikation und
4. die autotrophe Denitrifikation.

Außerdem wurden die Parameter der Steuerfunktion für die Temperatur geschätzt. Bei der Steuerfunktion für den Bodenwassergehalt wurden ausschließlich Parameter- und Kennwerte aus der Literatur verwendet.

Als Datengrundlage für die Parameterschätzungen dienten, mit Ausnahme des Modells für die autotrophe Denitrifikation, Labordaten aus der Literatur. Es ist dabei zu beachten, dass bei dieser Vorgehensweise alle Parameterschätzungen mit unterschiedlichen Böden erfolgten, über deren physikalische Eigenschaften (z.B. Textur) nur sehr unvollständige bis gar keine Informationen vorlagen. Da die Anzahl der zu schätzenden Parameter im Verhältnis zur Anzahl der verfügbaren Datenwerte immer noch recht groß war und es immer mehrere Kombinationen von Parametern (und Anfangswerten) gibt, die zu einer akzeptablen Übereinstimmung zwischen Modellergebnis und gemessenen Daten führt (JANSSEN & HEUBERGER, 1995), wurde, soweit auffindbar, auf Parameterwerte aus der Literatur zurückgegriffen. Diese Parameter wurden im Schätzverfahren konstant gehalten.

Die Wachstumsdynamik und Stickstoffumsätze des Pflanzenbestandes sowie die N-Konzentration im Boden haben wechselseitig einen großen Einfluss aufeinander. Da die Weiterentwicklung des Pflanzenmodells nicht Teil dieser Arbeit war, wurde es auch nicht in die Parameterschätzung einbezogen. Einige Pflanzenparameter wurden nach visueller Einschätzung variiert, soweit dies notwendig und plausibel erschien (siehe Ergebnisse der Freilandmodellierung, Kapitel 4).

Ein weiterer Unsicherheitsfaktor bei der Ermittlung der Modellparameter liegt in der Abschätzung der Anfangswerte der einzelnen Stoffkompartimente. Insbesondere die Größe der einzelnen organischen C- und N-Pools ist in der Regel nicht direkt aus dem verwendeten Datensatz ablesbar. In diesem Fall werden möglichst sinnvolle Werte abgeleitet, indem die Vorgeschichte der Böden interpretiert wird, die für Inkubationsversuche verwendet wurden (z.B. Art, Menge und Zeitpunkt des Eintrags von Ernteresiduen). Auch aus der Dynamik der verfügbaren Daten, wie z.B. der kumulierten CO₂-Emissionen, können Rückschlüsse auf die Anfangswerte der organischen C- und N-Pools gezogen werden.

2.5.2 Steuerfunktionen für die Witterungseinflüsse

Temperaturfunktion - aerober Modellteil

Die Temperatur kann in SIMULAT-NC einen limitierenden Einfluss auf die mikrobielle Aktivität r ausüben. Der Zusammenhang zwischen den beiden Größen wird in Form einer O'Neill-Funktion abgebildet (siehe Kapitel 2.1), für die drei Parameter zu bestimmen sind. Da keine gemessenen Werte vorliegen, die direkte Rückschlüsse über den Zusammenhang zwischen der Veränderung der mikrobiellen Aktivität r und einer Änderung der Temperatur erlauben, musste auf eine Näherung zurückgegriffen werden: Es wurde angenommen, dass die Temperaturabhängigkeit der Aktivität r proportional ist zur Temperaturabhängigkeit der CO₂-Emissionsrate. Näherungsweise deshalb, weil nicht nur das mikrobielle Wachstum zur Emission von CO₂ beiträgt, sondern auch der Energiebedarf der Prozesse, die unter dem Stichwort Erhaltungsumsatz der mikrobiellen Biomasse zusammengefasst werden. Diese Näherung ist dann erlaubt, wenn dem Boden ausreichend Substrat zugegeben wird, das das Wachstum der mikrobiellen Biomasse so weit anregt, dass der Hauptanteil des freigesetzten CO₂ wirklich aus dem Wachstumsprozess stammt und der Erhaltungsumsatz vernachlässigbar ist.

Für die Parameterbestimmung der Temperaturfunktion sind Daten von STOTT et al. (1986), wie beschrieben in GRANT & ROCHETTE (1994), verfügbar. Sie stammen aus einem Inkubationsexperiment, bei dem die Zufuhr von Rückständen aus Weizenstroh zu einem, je nach Inkubationstemperatur, mehr oder weniger starken Anstieg der CO₂-Emissionsrate führen. Das beschriebene Experiment ist gut geeignet für die Kalibrierung der Temperaturfunktion eines Modells, das für Freilandversuche eingesetzt werden soll, da Messwerte über einen Temperaturbereich zwischen 0°C und 20°C erhoben wurden. So sind auch tiefe Temperaturen berücksichtigt, die im mitteleuropäischen Klima häufig vorkommen. Allerdings deckt das Experiment den Temperaturbereich, der für mikrobielle Prozesse als optimal angesehen wird, nicht ab. Die Optimaltemperatur T_{opt} der O'Neill-Funktion wurde daher, basierend auf Mineralisierungsdaten für eine größere Anzahl von Böden in einer Studie von KIRSCHBAUM (1995), auf 36,9 °C festgesetzt. Für die Ermittlung der zwei verbleibenden Parameter T_{max} und q wurde jeweils das Maximum der CO₂-Emissionsraten für jede Temperaturstufe aus dem Datensatz von STOTT et al. (1986) verwendet. Die maximalen Emissionsraten für Temperaturen > 20°C wurden durch lineare Extrapolation der Datenpunkte ermittelt. Es wurde so extrapoliert, dass sich die Rate für den Temperaturbereich 20°C bis 30°C annähernd verdoppelt ($Q_{10}=2,1$ nach KIRSCHBAUM, 1995). Mit Hilfe des Wertes bei 36,9 °C ($=T_{opt}$) wurde der Datensatz auf 1 normiert. Das Ergebnis der Parameterschätzung ist in Tabelle 3 und Abbildung 9 dargestellt.

Tabelle 3 Parameterwerte der Temperaturfunktion für die aeroben Prozesse des NC-Modells.

| Parameter | Schätzer (Varkoeff. [%]) | Anmerkung/Quelle |
|-------------------------|---------------------------|------------------------|
| q | 1,7 (0,61) | Geschätzt |
| T_{max} | 43,8 (6,76) | Geschätzt |
| T_{opt} | 36,9 | Fix, KIRSCHBAUM (1995) |
| ME = 0,95; RMSE = 0,026 | | |

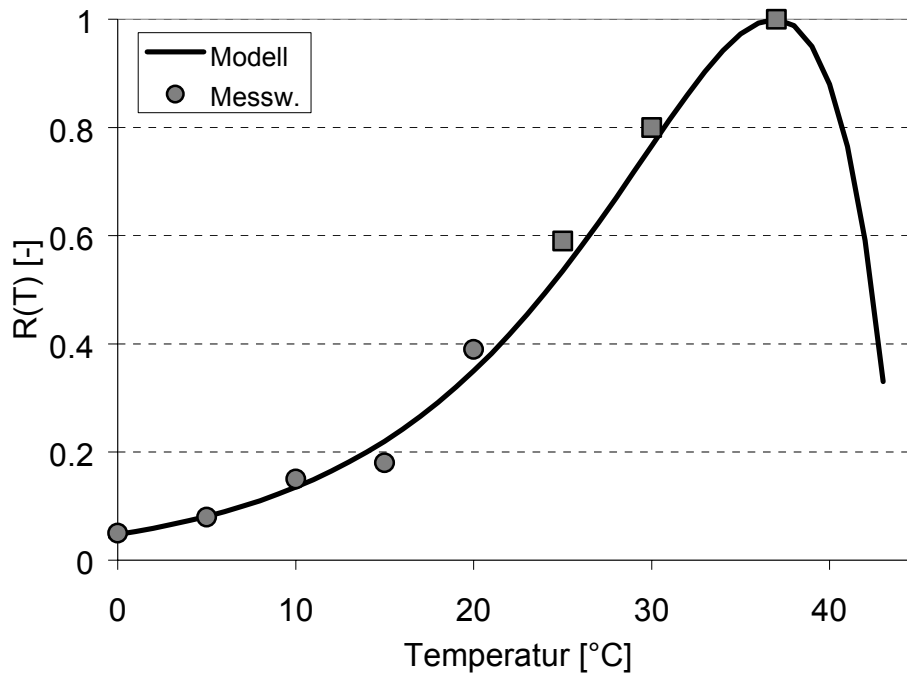


Abbildung 9 Anpassung der Steuerfunktion für die Temperatur $R(T)$ an Daten von STOTT et al. (1986). Die Kreise entsprechen gemessenen Werten, die Quadrate stammen aus der Extrapolation (siehe Text).

Die Modelleffizienz und der RMSE wurden nur auf der Basis der gemessenen Werte berechnet. Mit einer Modelleffizienz von $ME=0,95$ ist die Übereinstimmung zwischen den Messwerten und der gewählten Temperaturfunktion sehr gut.

Die Funktion wird im Freilandmodell für eine mittlere Tagestemperatur des Bodens im Bereich -2°C bis 43°C definiert. Bei Verlassen dieses Temperaturbereiches wird $R(T)=0$ gesetzt. Auch für leichte Minustemperaturen wird eine gewisse Aktivität angenommen, da die mikrobielle Biomasse im Inkubationsexperiment bei Substratzugabe auch bei 0°C noch eine deutliche Mineralisierungsaktivität zeigt.

Temperaturfunktion - anaerober Modellteil

Die Parameter der Temperaturfunktion für den anaeroben Modellteil wurden mit Hilfe von Daten aus einem Laborexperiment von KÖBRICH (1995) geschätzt. Im Temperaturbereich zwischen 0°C und 30°C wurden Bodenproben für jeweils 24 Stunden inkubiert. Als Maß für die mikrobielle Aktivität dient hier die N_2O -Konzentration, die sich bei jeder Temperaturstufe im Reaktionsgefäß einstellt. Die Bodenproben wurden mit Acetylen begast. Die N_2O -Menge, die sich im Reaktionsgefäß ansammelt, enthält dadurch kein N_2O aus dem Nitrifikationsprozess und es wird der Messung kein N_2O durch Weiterreaktion zu N_2 entzogen. Unter diesen Umständen kann die über einen festgelegten Zeitraum entwickelte N_2O -Konzentration als Maß für die Aktivität der Denitrifikantenpopulation unter verschiedenen Temperaturbedingungen dienen. Da bei der Vorbehandlung von Bodenproben für einen Inkubationsversuch in der Regel leicht verwertbare organische Substanz freigesetzt wird, ist davon auszugehen, dass

für die relativ kurze Inkubationszeit so viel C-Substrat zur Verfügung steht, dass die N_2O -Emissionen nicht vom Energiebedarf für den Erhaltungsumsatz, sondern für das Wachstum der Denitrifikanten dominiert werden.

Die Temperaturfunktion $R(T)$ wird über die N_2O -Konzentration bei 30°C auf eins normiert, da die Kurve für die N_2O -Konzentrationswerte zwischen 25 und 30°C deutlich abflacht, so dass davon auszugehen ist, dass in diesem Temperaturbereich ein Optimum liegt. Das erste Optimum wird direkt aus den Daten abgelesen und als Parameter T_{opt1} festgesetzt (siehe Tabelle 4). Über den Parameter α wird die Sensitivität der ersten Temperaturfunktion für tiefe Temperaturen geregelt, d.h. je höher der Wert von α , desto stärker reagiert die Population im tiefen Temperaturbereich auf eine Erhöhung der Temperatur. Der Parameter β wurde visuell an die Daten angepasst.

Tabelle 4 Parameterwerte für die Temperaturabhängigkeit der Aktivität der Denitrifikantenpopulation.

| Parameter | Schätzer (Varkoeff. [%]) | Anmerkung/Quelle |
|-------------------------|--------------------------|---------------------|
| α | 2,5 (9,52) | Geschätzt |
| β | 0,1 | Fix |
| T_{opt1} | 6,0 | Fix, KÖBRICH (1995) |
| q | 1,8 (2,81) | Geschätzt |
| T_{max} | 51,0 (15,13) | Geschätzt |
| T_{opt2} | 30,0 (1,37) | Geschätzt |
| ME = 0,99; RMSE = 0,029 | | |

Wie aus Abbildung 10, der hohen Modelleffizienz $\text{ME}=0,99$ und den relativ niedrigen Variationskoeffizienten der geschätzten Parameter zu ersehen ist, lässt sich die gewählte Doppelfunktion sehr gut an die Ergebnisse des Inkubationsversuches von KÖBRICH (1995) anpassen.

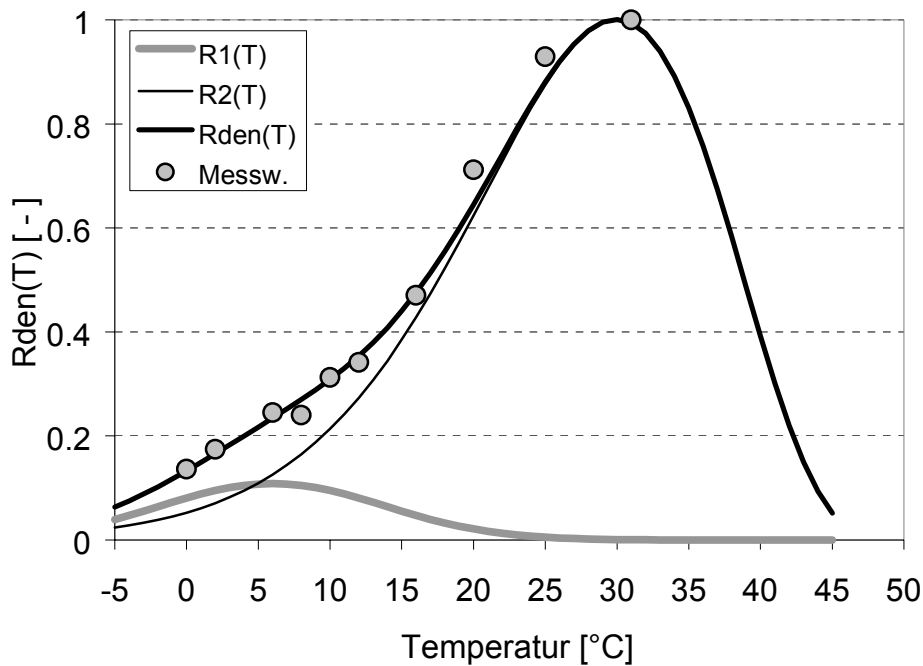


Abbildung 10 Anpassung der zusammengesetzten Temperaturfunktion $R_{den}(T)$ für die Aktivität der Denitrifikantenpopulation; Daten von KÖBRICH (1995).

Bodenwasserfunktion

Als Parameter für die Bodenwasserfunktion $R(\Theta_{rel})$ dienen Kennwerte aus der Literatur. Es ist der optimale relative Wassergehalt Θ_{opt} und ein Formparameter λ festzulegen (siehe Tabelle 5). Nach LINN & DORAN (1984) erreicht die mikrobielle Aktivität ihr Maximum, wenn etwa 60 % des Porenvolumens im Boden mit Wasser gefüllt sind. Wird dieser Wert über- oder unterschritten, beginnt die mikrobielle Aktivität abzunehmen. Der Optimalwert für den relativen Wassergehalt Θ_{opt} wird daher auf 0,6 festgesetzt. Es werden die gleichen Parameter für den aeroben und anaeroben Modellteil genutzt. Der Verlauf der Steuerfunktionen für den Bodenwassergehalt unter aeroben und anaeroben Bedingungen ist in Abbildung 4b zu sehen.

Tabelle 5 Parameterwerte für die Bodenwasserfunktion (aerob und anaerob).

| Parameter | Parameterwert | Anmerkungen/Quellen |
|----------------|---------------|--------------------------|
| λ | 3,0 | Fix |
| Θ_{opt} | 0,6 | Fix, LINN & DORAN (1984) |

2.5.3 Mineralisierung/Immobilisierung und mikrobielles Wachstum

Die Parameter der Modellgleichungen, die Mineralisierung und Immobilisierung der entsprechenden Kohlenstoff- und Stickstoffverbindungen sowie die mikrobielle Wachstumsdynamik beschreiben, wurden gemeinsam bestimmt. Dies war möglich durch einen Laborversuch von SMITH et al. (1986), bei dem die zeitliche Veränderung von vier Zustandsgrößen von SI-

MULAT-NC gleichzeitig gemessen wurde. Es liegen Zeitreihen für die Konzentration an mikrobieller Biomasse (C_b), für die wasserlöslichen Kohlenstoffverbindungen (C_s), für den mineralischen Stickstoff (N_{min}) und die kumulierte CO_2 -Entwicklung vor. Der verwendete Boden stammt aus den oberen 15 cm einer ackerbaulich genutzten Fläche. Er wurde gesiebt und dann bei 4°C bis zum Versuchsbeginn gelagert. Die Inkubation lief über einen Zeitraum von 60 Tagen und wurde bei einer Temperatur von 22°C und einem Wassergehalt von 20 Gew. % durchgeführt. Der Versuch wurde mit dem Ziel konzipiert, den Erhaltungsenergieumsatz der Mikroorganismen zu ermitteln, d.h. es erfolgte keine Zugabe von C- oder N-Substrat, so dass das System einen quasi-stationären Zustand erreichen konnte. Gegeben sind neben der Temperatur, dem Wassergehalt und den vier oben genannten Variablen der Gesamt-C-Gehalt des Bodens mit 20,9 g C kg⁻¹ Boden und der Gesamt-N-Gehalt mit 1,44 g N kg⁻¹ Boden. Das C/N-Verhältnis der organischen Bodensubstanz beträgt damit 15:1. Der Anteil an mikrobiellem Biomasse-C an der organischen Bodensubstanz liegt mit 2,9 % im mittleren und nach ANDERSON & DOMSCH (1989) typischen Bereich für Schläge mit Fruchtfolgenwechsel, mineralischer N-Düngung und begrenzter Einarbeitung von Ernteresiduen (z.B. Getreidestoppeln und -wurzeln).

Startwerte

Der verfügbare Datensatz ist im Vergleich zur Anzahl der Stoffkompartimente des Modells immer noch unvollständig. Es war daher notwendig, vor der Parameterbestimmung Annahmen über die Startwerte der nicht gemessenen Zustandsvariablen zu machen:

(1) Die Gesamtkohlenstoffmenge des Bodens musste sinnvoll zwischen den vier Kohlenstoffpools des Modells aufgeteilt werden. Für den löslichen Kohlenstoff C_s und den mikrobiellen Kohlenstoff C_b liegen Daten vor, die als Anfangswerte eingesetzt werden konnten. Kritisch war die Abschätzung für die labile Fraktion C_d , d.h. für den Pool, der über den betrachteten Zeitraum von zwei Monaten und unter den optimalen Temperatur- und Bodenwasserbedingungen entscheidend zur Stoffdynamik aller Modellkomponenten beitragen dürfte. So deutet die bis zum Tag 20 auf etwa die Hälfte abnehmende Rate der CO_2 -Emissionen und die bis dahin gebildete CO_2 -Menge von mehr als 500 kg C darauf hin, dass neben dem C_s -Pool ein weiterer Kohlenstoffpool in größerem Umfang verwertet wird (siehe Abbildung 11a). Um die Anfangsgröße dieses Pools abzuschätzen, wird die mittelschnell zersetzbare C_d -Fraktion zwischen 1 und 1000 kg C ha⁻¹ 10 cm⁻¹ variiert und jeweils eine neue Parameterschätzung durchgeführt, die mit Hilfe des Bestimmtheitsmaßes R^2 bewertet wurde. Diese Schätzungen lieferten Bestimmtheitsmaße zwischen $R^2=0,817$ für einen Anfangswert von $C_d=1,0$ über $R^2=0,994$ für $C_d=500$ bis $R^2=0,965$ für $C_d=1000$ kg C ha⁻¹ 10 cm⁻¹. Als Anfangswert für das C/N-Verhältnis dieser Fraktion wurde jeweils ein Wert von 50:1 angenommen. Die beste Übereinstimmung bei einem Wert von 500 kg C scheint plausibel, wenn man von einer Zufuhr von ca. 3500 kg organischer Substanz pro Hektar, z.B. in Form der Trockenmasse von Wurzeln in den obersten 30 cm des Bodens und einem Drittel einer mittleren Strohernte als Weizenstoppen, ausgeht. Dann ergibt sich bei einem C-Anteil von 45 % bei Stroh und Wurzeln und bei Einarbeitung in die oberen 30 cm des Bodens eine Kohlenstoffzufuhr von 525 kg C ha⁻¹ 10

cm^{-1} . Subtrahiert man von diesem Wert den Anteil an wasserlöslichem Kohlenstoff und berücksichtigt noch einen Anteil an Ernteresiduen aus der vorherigen Ernteperiode (Ernteresiduen werden in Mitteleuropa innerhalb eines Jahres um etwa 70 % abgebaut (HAIDER & MARTIN, 1979)), so erscheint ein Anfangswert von $500 \text{ kg C}_d \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ plausibel. Das C/N-Verhältnis dieser Fraktion (50) führt zu einem Anfangs-N-Gehalt, der gut übereinstimmt mit den mittleren Konzentrationen, die RICHTER et al. (1982) mit Hilfe eines Modells für die N-Fraktion des N_d entsprechenden "decomposable plant material" von 13 Böden ermittelt haben. Die verbleibende Differenz zwischen der gegebenen Gesamtkonzentration an organischer Substanz und der Gesamtmenge an organischem C der Modellpools C_d , C_b und C_s wurde als Humuspool C_h angesetzt. Mit dem N-Anteil der Humusfraktion wurde ebenso verfahren.

(2) Für das C/N Verhältnis der mikrobiellen Biomasse wurde ein Anfangswert von 6,0 angenommen (HENRIKSEN & BRELAND, 1999).

(3) Der Startwert für die mikrobielle Aktivität r , wurde auf 0,07, d.h. relativ hoch angesetzt, da der Boden schon einen Tag vor Beginn der Inkubation auf einen optimalen Wassergehalt eingestellt wurde und innerhalb dieses Tages bereits umgerechnet $89 \text{ kg CO}_2\text{-C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ freigesetzt wurden.

(4) Die Nitrifikation wurde für die Schätzung nicht berücksichtigt, da die Daten für die mineralische Stickstoffkonzentration nur als Gesamtheit von NO_3^- und NH_4^+ ($=N_{min}$) gegeben sind.

(5) Es wurde angenommen, dass keine Denitrifikation stattfindet, folglich werden die Anfangskonzentrationen für NO_2^- , N_2O und N_2 auf null gesetzt. Eine Auflistung aller Startwerte ist in Tabelle 6 zu finden.

Tabelle 6 Startwerte für die Parametrisierung des Modellteils für Mineralisierung/Immobilisierung und mikrobielle Wachstumsdynamik (Daten von SMITH et al. (1986), Boden Palouse). Die jeweiligen Anfangswerte sind, mit Ausnahme der dimensionslosen mikrobiellen Aktivität r , in $\text{kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ angegeben.

| Variable | Startwert | Variable | Startwert |
|---------------|-----------|-----------------------|---------------|
| r | 0,07 | N_b | 148 |
| C_b | 885 | N_d | 10 |
| C_s | 120 | N_h | 1988 |
| C_d | 500 | N_{min} | 14,6 |
| C_h | 30345 | NH_4^+ | als N_{min} |
| CO_2 | 89 | NH_4s | 0 |
| | | NO_3^- | als N_{min} |
| | | NO_2^- | 0 |
| | | N_2O | 0 |
| | | N_2 | 0 |

Parameterschätzung

Aufgrund der begrenzten Anzahl an Daten wurden nicht alle Parameter für die Schätzung freigegeben. Es wurden, soweit vorhanden, Literaturwerte verwendet (siehe Tabelle 7) oder plausible Abschätzungen vorgenommen.

Eine kritische Größe bei mikrobiellen C- und N-Umsätzen im Boden ist die mikrobielle Nutzungseffizienz Y_{Cs} für das schnell verfügbare Substrat C_s . Diese Größe regelt, welcher Anteil des verbrauchten C-Substrates für den Aufbau von mikrobieller Biomasse genutzt wird und hat daher über das C/N-Verhältnis der Biomasse Einfluss auf die N-Immobilisierung. Das heißt, je größer der C_s -Anteil, der für den Aufbau von Biomasse genutzt wird, desto mehr N kann (bei konstantem C/N-Verhältnis) immobilisiert werden. In der Literatur werden für die Substratnutzungseffizienz Werte zwischen 20 und 60 % angegeben. Eine hohe Nutzungseffizienz von 60 % wird für energiereiche und schnell abbaubare Substrate wie Glukose beobachtet, während für die Nutzung der organischen Substanz des Bodens niedrigere Werte von 40 % (z.B. PARNAS, 1975) bis zu 20 % für die Nutzung der stabileren organischen Bodenfraktion angenommen werden (VAN VEEN et al., 1985). Auch wenn in SIMULAT-NC von den Mikroorganismen nur das lösliche C-Substrat direkt verwertet wird, was eine hohe Nutzungseffizienz, vergleichbar der der Glukoseverwertung, nahe legt, so geht dieser Verwertung doch in der Regel ein energieintensiver Abbau komplexer organischer Moleküle voraus. Die Nutzungseffizienz Y_{Cs} wird daher auf einen relativ niedrigen Wert von 0,3 festgesetzt. Auf diese Weise wird indirekt der Energieverbrauch der Mikroorganismen beim Abbau der C_d - als auch der C_h -Fraktion berücksichtigt.

Ein weiterer Unsicherheitsfaktor besteht darin, dass bei der Schätzung der Parameter für den Abbau von C_d und C_h , die im Wesentlichen über die Daten für die CO_2 -Entwicklung bestimmt werden, nicht klar ist, welcher Anteil aus dem einen und welcher Anteil aus dem anderen Pool kommt. Über das Schätzverfahren können so leicht Parameterwerte erzeugt werden, die zu einem unrealistisch hohen Abbau des Humuspools führen. Die spezifische maximale Umsatzrate für C_h (ηCh_{max}) wird daher so festgesetzt, dass der Abbau des Humuspools über ein Jahr unter den nahezu optimalen Witterungsbedingungen des Experimentes maximal 4 % beträgt. Dieser Wert ist doppelt so hoch wie bei GISI (1990), der für landwirtschaftliche Flächen ohne Zufuhr von Ernteresiduen unter Freilandbedingungen eine mittlere jährliche Humusmineralisierung von 1 % bis 2 % angibt.

Über die relative Größe der Parameterwerte von K_{rCs} und K_{rN} , die Habsättigungskonstanten der mikrobiellen Aktivität r , wird gesteuert, welcher der beiden Nährstoffe (C_s oder N_{min}) limitierend auf die mikrobielle Aktivität wirkt. Der Wert für K_{rCs} wurde so gewählt, dass sich die mikrobielle Aktivität bei einer C_s -Konzentration von $2000 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ dem Wert eins nähert (BLAGODATSKY et al., 2000). Der Wert liegt damit in der gleichen Größenordnung wie bei PANIKOV (1995) und PANIKOV et al. (1995) beschrieben. Für K_{rN} wurde ein um den Faktor drei niedrigerer Wert als für K_{rCs} gewählt, da Stickstoff bei niedrigeren Konzentrationen limitierend wirkt als das Kohlenstoffsubstrat. Werden einem Boden beispiels-

weise 100 kg N zugeführt ($R(N_{min})=0,5$), so sind mehr als 300 kg löslicher Kohlenstoff C_s notwendig, um zu verhindern, dass $R(C_s)$ den Wert von $R(N_{min})$ unterschreitet. Dies entspricht dem höheren Bedarf an C-Substrat, das sowohl für den Aufbau mikrobieller Biomasse wie auch als Energielieferant der heterotrophen Mikroorganismen dient.

Die Michaelis-Menten-Konstanten der einzelnen Stoffkompartimente, d.h. die Konzentrationen, bei denen auf dem jeweiligen Substrat die halbe maximale Umsatzgeschwindigkeit erreicht wird, wurden aus Literaturwerten hergeleitet. Für die Halbsättigungskonstante typischer schnell verwertbarer C-Substrate werden in der Literatur Werte zwischen umgerechnet 85,5 kg C ha⁻¹ 10 cm⁻¹ für Glukose (ANDERSON & DOMSCH, 1986) über 105 kg C ha⁻¹ 10 cm⁻¹ für Wurzelexsudate (DARRAH, 1991) bis 375 kg C ha⁻¹ 10 cm⁻¹, ebenfalls für Glukose (PANIKOV, 1995), angegeben. Der entsprechende Parameter in SIMULAT-NC, K_{C_s} , wird auf 200 kg C ha⁻¹ 10 cm⁻¹ festgesetzt. Die Michaelis-Menten-Konstante K_{C_d} für das labile Substrat (C_d , N_d) bekommt den Wert 450 kg C ha⁻¹ 10 cm⁻¹ (PANIKOV, 1995) und liegt damit in der gleichen Größenordnung wie die C-Menge, die dem Boden typischerweise in Form von Ernteresiduen zugeführt wird. Auch die Michaelis-Menten-Konstante für den Humusananteil des Boden, K_{C_h} , wird in der Größenordnung des Humus-C-Gehaltes gewählt (29300 kg ha⁻¹ 10 cm⁻¹) und ist damit vergleichbar mit dem Wert, den BLAGODATSKY et al. (1998) für den Abbau der organischen Substanz in ihrem mikrobiellen Wachstumsmodell ermittelt haben.

Bei der Parameterschätzung wurden 4 von 17 Parametern zur Optimierung freigegeben. Dies sind die maximale mikrobielle Sterberate α_{max} , die maximale Abbaurate für C_d ($\eta C d_{max}$) sowie die spezifischen mikrobiellen Wachstumsraten auf C_s ($\mu C s_{max}$) und NH_4^+ (μNH_4_{max}). Die Parameter und ihre Schätzwerte sind in Tabelle 7 zu finden.

Tabelle 7 Parameterwerte für den Modellteil Mineralisierung/Immobilisierung und mikrobielles Wachstum.

| Parameter | Schätzer (Varkoeff. [%]) | Anmerkung/Quelle |
|-------------------|--------------------------|-----------------------------|
| $\mu C_{s_{max}}$ | 2,01 (7,04) | Geschätzt |
| K_{Cs} | 200 | Fix |
| α_{max} | 0,36 (1,83) | Geschätzt |
| f_{Cd} | 0,55 | Fix, MARUMOTO et al. (1982) |
| f_{Cs} | 0,002 | Fix |
| K_{rN} | 100 | Fix |
| K_{rCs} | 300 | Fix, PANIKOV (1995) |
| $\mu NH4_{max}$ | 1,10 (2,6) | Geschätzt |
| K_{NH4} | 15,0 | Fix, KNAPP et al. (1983) |
| Y_{Cs} | 0,3 | Fix |
| mn_{Cs} | 0,18 | Fix, SMITH et al. (1986) |
| ηCd_{max} | 1,37 (12,3) | Geschätzt |
| K_{Cd} | 450 | Fix, PANIKOV (1995) |
| k_{hum} | 0,005 | Fix |
| ηCh_{max} | 0,64 | Fix |
| K_{Ch} | 29330 | Fix |

Tabelle 8 Modelleffizienz ME und Mittlere Fehlerquadratsumme RMSE für den Modellteil Mineralisierung/Immobilisierung und mikrobielles Wachstum.

| | C_b | C_s | CO_2 | N_{min} |
|------|-------|-------|--------|-----------|
| ME | 0,871 | 0,745 | 0,999 | 0,974 |
| RMSE | 23,70 | 9,56 | 10,86 | 1,74 |

Ziel dieser Parameterschätzung war es, das Modell für einen Zustand ohne Zufuhr von schnell verfügbarem C- oder N-Substrat zu kalibrieren. Es sollte in erster Linie getestet werden, ob das Modell in der Lage ist, die Einstellung eines annähernd stationären Zustandes, wie er durch die Daten von SMITH et al. (1986) beschrieben wird, nachzuvollziehen. Dies ist offensichtlich der Fall, denn wie aus den Abbildung 11a und b zu ersehen ist und wie die Werte für die Modelleffizienz ME in Tabelle 8 zeigen, lassen sich die CO_2 -Freisetzungsrates und die N-Mineralisierung mit den optimierten Parametern sehr gut abbilden. Sowohl die N-Mineralisierungsrate als auch die CO_2 -Entwicklung gehen nach einem anfänglichen Peak stark zurück. Auch die Sterberate der mikrobiellen Biomasse halbiert sich innerhalb von 30 Tagen. Die langfristige Stabilisierung der Konzentration des C_s -Pools wird ebenfalls sehr gut abgebildet (siehe Abbildung 11b). In der Anfangsphase wird die C_s -Konzentration vom Modell allerdings um rund 20 kg C unterschätzt. Gleichzeitig zeigen die Daten für die mikrobielle Biomasse innerhalb der ersten 6 Tage eine Abnahme um fast 100 kg C, die vom Modell nicht nachvollzogen wird. Diese anfängliche Überschätzung der mikrobiellen Biomasse deutet darauf hin, dass die mikrobielle Biomasse aufgrund der Vorbehandlung des Bodens zu Be-

ginn des Experimentes noch eine erhöhte Sterberate aufweist und den löslichen C-Pool teilweise wieder auffüllt. Da es bei dieser Kalibrierung aber in erster Linie darum ging, das Modell auf eine langfristige Stabilisierung des Systems einzustellen, wurde darauf verzichtet, in dieser Modellversion kurzfristige Einflüsse zu integrieren, die spezifisch für Laborverhältnisse sind. Vergleichbare Störungen des Bodengefüges treten im Freiland durch Maßnahmen der Bodenbearbeitung, wie z.B. Pflügen, auf. Für diese Maßnahmen kann angenommen werden, dass ein festgesetzter Prozentsatz der Mikroorganismenpopulation abstirbt.

Es wurde zusätzlich getestet, wie sich die Modellvariablen über den Zeitraum von einem Jahr verhalten, um (1) die mathematische Stabilität des Differentialgleichungssystems sowie (2) die Plausibilität der zeitlichen Entwicklung der Modellkompartimente zu testen. Die Ergebnisse dieses Tests sind im Kapitel Modellverhalten und –validierung beschrieben. Eine Überprüfung der Stickstoff- und Kohlenstoffbilanz der insgesamt 15 Stoffflüsse in dieser Modellvariante ergab eine ausgeglichene Bilanz.

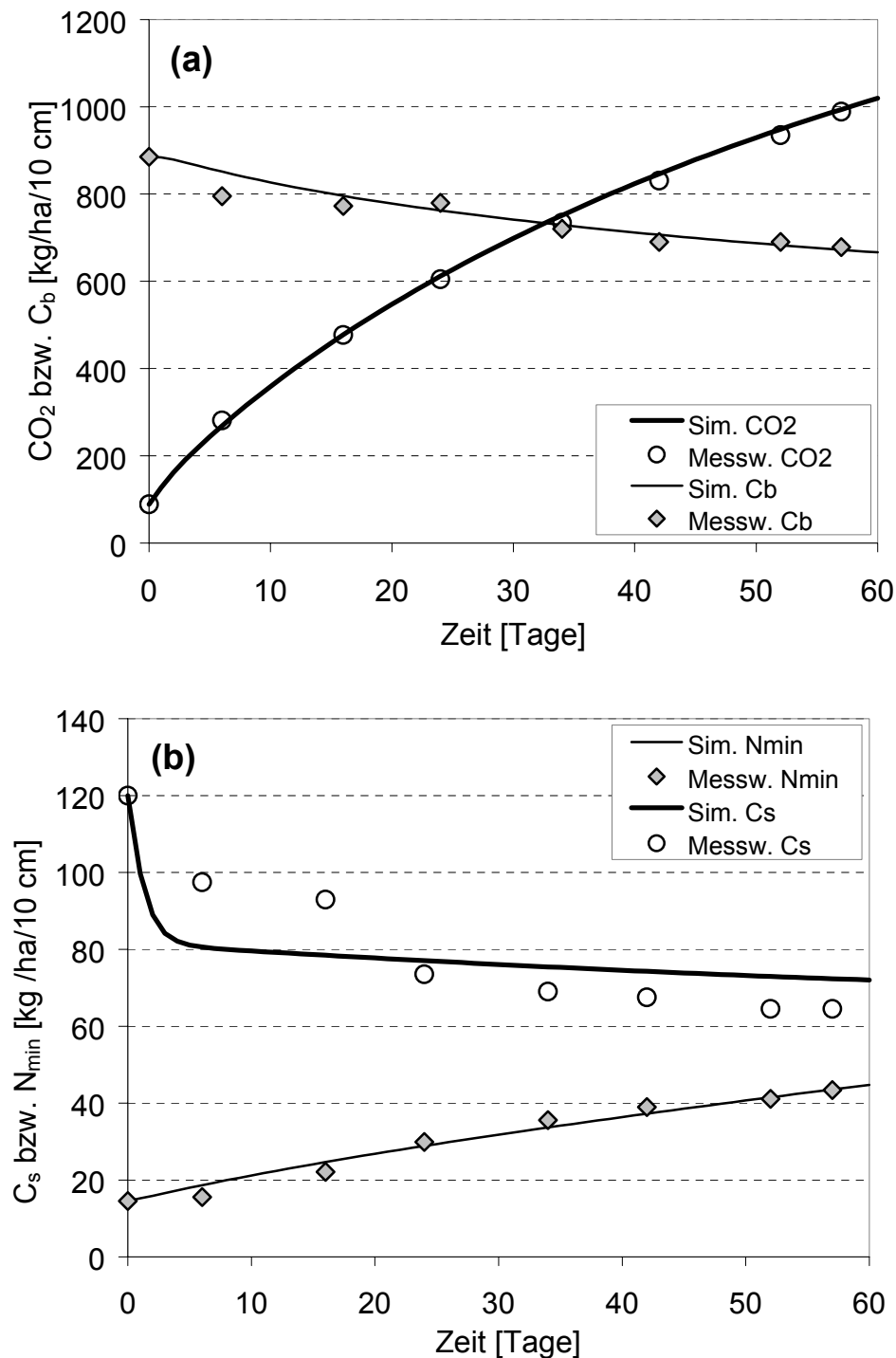


Abbildung 11 (a) CO₂-Emissionen und Konzentrationsverlauf der mikrobiellen Biomasse (C_b). (b) N-Mineralisierung und Konzentrationsverlauf der löslichen Kohlenstofffraktion (C_s). Daten aus SMITH et al. (1986) (Palouse-Boden).

2.5.4 Heterotrophe Denitrifikation

Die Parameter für das Denitrifikationsmodell wurden mit Hilfe von Daten eines elftägigen Inkubationsexperimentes von LEFFELAAR & WESSEL (1988) geschätzt. In diesem Experi-

ment wurde ein lehmiger Boden zu Versuchsbeginn mit umgerechnet $263 \text{ kg NO}_3^- \text{-N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ und 780 kg schnell verwertbarem Kohlenstoffsubstrat C_s in Form von Glukose versetzt und anschließend in Petrischalen inkubiert. Die Anfangskonzentration an Nitrat-N betrug insgesamt $473 \text{ kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$, da im Boden bereits Nitrat vorhanden war. Der Gesamtgehalt an organischem Kohlenstoff ist mit $1,3 \%$ angegeben, der organische Stickstoffgehalt des Bodens liegt bei $0,14 \%$. Es wurde bei einem gravimetrischen Wassergehalt von $0,22 \text{ g g}^{-1}$ Boden und einer Temperatur von $22,7^\circ\text{C}$ unter Neon-Atmosphäre, d.h. unter vollständigem Ausschluss von Sauerstoff, inkubiert. Da im Modell die Sauerstoffkonzentration nicht explizit berechnet, sondern indirekt über den Bodenwassergehalt simuliert wird, wurde für die Simulation der relative Wassergehalt auf $1,0$ gesetzt. Dies kommt aus Modellsicht einer vollständigen Sauerstofffreiheit gleich. Für die anderen Funktionen des Wassers im Boden, wie z.B. die als Transportmedium für Substrate, wird angenommen, dass der eingestellte Wassergehalt von 22 Gew. \% in keiner Weise limitierend wirkt.

Die maximalen Nitrifikationsraten μ_{n1max} und μ_{n2max} wurden für die Parameterbestimmung auf null gesetzt, da Nitrifikanten für die Oxidation von Ammonium Sauerstoff brauchen. Folglich wird das aus den organischen Pools mineralisierte Ammonium nur durch die mikrobielle Aufnahme verwertet und es erfolgt keine Nitratnachlieferung durch die Nitrifikation.

Anfangswerte

Für die Parameterschätzung liegen Anfangswerte und Zeitreihen für die vier Zustandsvariablen $\text{NO}_3^- \text{-N}$, $\text{NO}_2^- \text{-N}$, $\text{N}_2\text{O-N}$ und $\text{N}_2\text{-N}$ vor. Da über die Vorgeschichte des Bodens in der Literatur keine Angaben gemacht wurden, mussten die Startwerte für die restlichen Modellvariablen abgeschätzt werden. Sie sind in Tabelle 9 zusammengefasst. Für die mikrobielle Biomasse C_b wurde angenommen, dass ihr Anteil am organischen Kohlenstoffgehalt des Bodens 2% beträgt und dass sie ein C/N-Verhältnis von $6,0$ aufweist. Außerdem wurde eine geringe Menge an zersetzbarer organischer Bodensubstanz C_d ($200 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$) mit einem weiten C/N-Verhältnis von 50 unter der Annahme eingeführt, dass dem verwendeten Boden in nicht allzu ferner Vergangenheit stickstoffarme Ernteresiduen zugeführt wurden. Der Anfangswert für die mikrobielle Aktivität wurde mit $r_{den}=0,001$ sehr niedrig angesetzt, um der Beobachtung gerecht zu werden, dass zu Versuchsbeginn aufgrund der aeroben Lagerungsbedingungen des Bodens noch kein nennenswerter Anteil wachsender Denitrifikanten existierte.

Tabelle 9 Anfangswerte für die Kalibrierung des Denitrifikationsmodells (Daten von LEFFELAAR & WESSEL, 1988). Die jeweiligen Anfangswerte sind, mit Ausnahme der dimensionslosen mikrobiellen Aktivität r_{den} , in $\text{kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ angegeben.

| Variable | Startwert | Variable | Startwert |
|-----------|-----------|-----------|-----------|
| r_{den} | 0,001 | N_b | 65 |
| C_b | 390 | N_d | 4 |
| C_s | 780 | N_h | 2100 |
| C_d | 200 | NH_4^+ | 5 |
| C_h | 19500 | NH_{4s} | - |
| CO_2 | 0 | NO_3^- | 473 |
| | | NO_2^- | 0 |
| | | N_2O | 0 |
| | | N_2 | 0 |

Wie aus den gemessenen Nitratwerten hervorgeht (siehe Abbildung 12), ist der Nitratabbau in zwei Phasen unterteilbar: Einer Lag-Phase von etwa einem Tag folgt eine Phase sehr schnellen Abbaus. Diese anfängliche Verzögerung der N_2O -Freisetzung wird bei der Umstellung von aeroben auf anaerobe Bedingungen häufig beobachtet. Sie ist darauf zurückzuführen, dass der mikrobielle Stoffwechsel unter aeroben Bedingungen ein anderes Enzymsystem aufweist als unter anaeroben Bedingungen. In der Regel dauert diese Umstellungsphase allerdings nur 1-8 Stunden (JACINTHE et al. 2002). Da die zeitliche Auflösung des N-Modells einen Tag beträgt, wird sie in den Modellgleichungen nicht explizit berücksichtigt. Um allerdings die Daten von LEFFELAAR & WESSEL (1988) für die Parameterschätzung verwerten zu können, wird die Verzögerungsphase durch die Einführung eines Retentionsfaktors in der mikrobiellen Aktivität r_{den} berücksichtigt. Er führt dazu, dass die mikrobielle Aktivität zu Versuchsbeginn für einen weiteren Tag auf dem sehr niedrigen Anfangsniveau bleibt.

Parameterschätzung

Für das Denitrifikationsmodell mussten insgesamt 14 Parameter bestimmt werden (siehe Tabelle 10). Für das Schätzverfahren wurden nur die maximalen Wachstumsraten μ_{maxNO_x} (mit $NO_x = NO_3^-$, NO_2^- bzw. N_2O) freigegeben. Die Werte für die drei Substratnutzungseffizienzen Y_{NO_3} , Y_{NO_2} und Y_{N_2O} sowie der Bedarf an Erhaltungsenergie mn_{NO_x} auf den drei betrachteten Stickoxiden und die drei Halbsättigungskonstanten K_{NO_3} , K_{NO_2} und K_{N_2O} wurden der Literatur entnommen (LEFFELAAR & WESSEL, 1988). Diese auf Messwerten für reine Denitrifikantenkulturen basierenden Daten von KOIKE & HATTORI (1975a,b) wurden in die Modelleinheiten umgerechnet und bei der Parameterschätzung konstant gehalten. Die drei Halbsättigungskonstanten werden wie bei LEFFELAAR & WESSEL (1988) als gleich groß angenommen. Die Halbsättigungskonstante K_{NO_3} für die mikrobielle NO_3^- -Verwertung hat den gleichen Wert wie im Modellteil unter aeroben Bedingungen. Sie hat einen höheren Wert als die Halbsättigungskonstante für NH_4^+ (K_{NH_4}), d.h. die maximale Umsatzrate wird erst bei höheren NO_3^- -Konzentrationen erreicht als für die NH_4^+ -Aufnahme. Diese Parametrisierung spiegelt die bevorzugte NH_4^+ -Aufnahme durch die Mikroorganismen wider.

Die Halbsättigungskonstanten der mikrobiellen Aktivität K_{rNden} und K_{rCden} wurden im Vergleich zum aeroben Modellteil (1) so eingestellt, dass die mikrobielle Aktivität bei typischen, d.h. relativ niedrigen Substratkonzentrationen auf $< 10 \%$ des Wertes unter aeroben Bedingungen gedrosselt wird und (2) bekommen beide Konstanten den gleichen Wert, da jetzt das C- und das N-Substrat sowohl für den Aufbau von Biomasse als auch die Bereitstellung von Energie zur Verfügung stehen müssen.

Tabelle 10 Parameterwerte des Denitrifikationsmodells.

| Parameter | Schätzer (Varkoeff. [%]) | Anmerkung/Quelle |
|--------------------|--------------------------|--------------------------------|
| $\mu_{NO_3_{max}}$ | 0,08 (4,11) | Geschätzt |
| $\mu_{NO_2_{max}}$ | 0,10 (4,14) | Geschätzt |
| $\mu_{N_2O_{max}}$ | 0,002 (6,67) | Geschätzt |
| K_{NO_3} | 27,4 | Fix, LEFFELAAR & WESSEL (1988) |
| K_{NO_2} | 27,4 | Fix, LEFFELAAR & WESSEL (1988) |
| K_{N_2O} | 27,4 | Fix, LEFFELAAR & WESSEL (1988) |
| mn_{NO_3} | 2,16 | Fix, LEFFELAAR & WESSEL (1988) |
| mn_{NO_2} | 0,84 | Fix, LEFFELAAR & WESSEL (1988) |
| mn_{N_2O} | 1,9 | Fix, LEFFELAAR & WESSEL (1988) |
| Y_{NO_3} | 0,1 | Fix, LEFFELAAR & WESSEL (1988) |
| Y_{NO_2} | 0,054 | Fix, LEFFELAAR & WESSEL (1988) |
| Y_{N_2O} | 0,004 | Fix, LEFFELAAR & WESSEL (1988) |
| K_{rCden} | 2500 | Fix |
| K_{rNden} | 2500 | Fix |

Tabelle 11 Modelleffizienz ME und Mittlere Fehlerquadratsumme RMSE für das Denitrifikationsmodell.

| | NO_3^- | NO_2^- | N_2O | N_2 |
|------|----------|----------|--------|-------|
| ME | 0,974 | 0,568 | 0,733 | 0,833 |
| RMSE | 30,60 | 42,06 | 42,77 | 63,48 |

Die Simulationsergebnisse und Daten sind in Abbildung 12a und b zu sehen.

Wie Abbildung 12 und die Modelleffizienz ME für NO_3^- , N_2O und N_2 zeigen, sind die Modellgleichungen gut bis sehr gut in der Lage, die gemessenen Konzentrationen für diese drei N-Verbindungen nachzuvollziehen. Für die Abfolge von Bildung und Abbau der N-Verbindungen ist die Übereinstimmung zwischen Modell und gemessenen Werten für alle vier Zustandsvariablen zufriedenstellend. Lediglich für NO_2^- unterschätzt das Modell sowohl die Konzentration in den ersten Tagen als auch die Höhe der Maximalkonzentration. Für N_2O stimmt der Zeitpunkt des Maximums im Modell ungefähr mit dem gemessenen Zeitpunkt überein, allerdings bleibt auch hier die Maximumkonzentration im Modell geringer als es die Messwerte ausweisen. Diese Abweichungen werden so akzeptiert, da eine Analyse der Ge-

samtmenge der vier an der Denitrifikation beteiligten N-Verbindungen zeigt, dass die Messwerte zwar eine zunehmende Tendenz aufweisen, aber innerhalb dieses Trends stark schwanken (siehe Abbildung 13). Insbesondere die Zunahme der N-Gesamtmenge um rund 20 % am dritten Tag der Inkubation ist kaum erklärbar, da bei Zugabe eines N-freien C-Substrates wie Glukose eher mit einer N-Immobilisierung zu rechnen ist. Das Modell berechnet so als Folge der mikrobiellen Immobilisierung eine kontinuierliche Abnahme der Konzentration der vier N-Verbindungen um insgesamt 6 % am Ende der Inkubation. Die Frage ist hier, ob und wie es zu einer Neubildung von NO_3^- und seiner Folgeprodukte kommen kann, oder ob die Zunahme der Gesamtmenge eher auf die zunehmende Ungenauigkeit der Messungen bei den gasförmigen N-Produkten im Vergleich zur Messgenauigkeit beim Nitrat zurückzuführen ist. Gegen eine Nachlieferung von NO_3^- sprechen die strikt anaeroben Versuchsbedingungen, die zwar eine Mineralisierung der organischen Substanz in geringem Umfang und damit eine NH_4^+ -Freisetzung erlauben. Die aber für die NO_3^- -Bildung notwendige Nitrifikation ist ein sauerstoffzehrender Prozess und sollte damit unter reiner Neon-Atmosphäre nicht ablaufen.

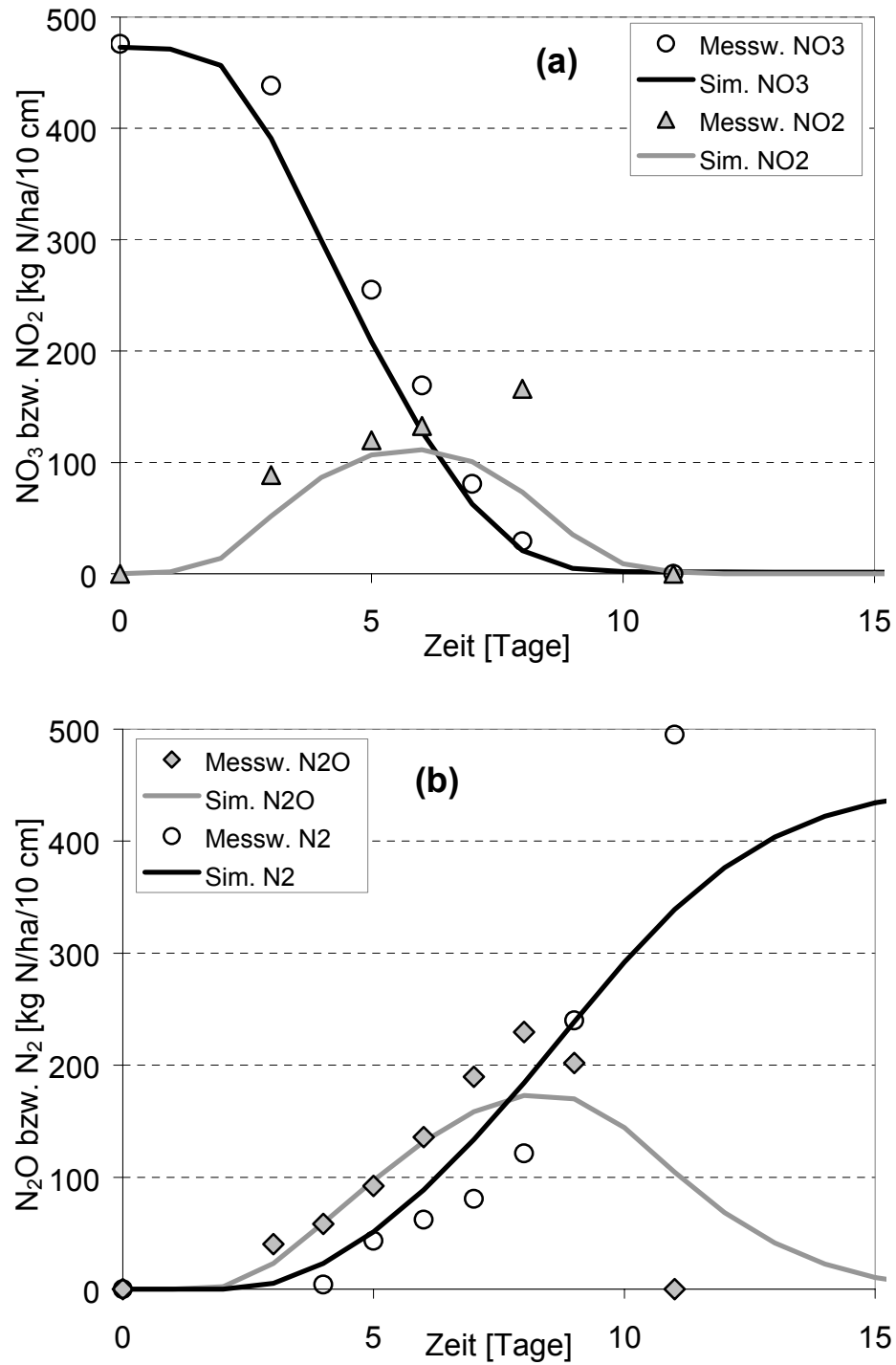


Abbildung 12 (a) Verlauf der simulierten NO₃⁻- und NO₂⁻-Konzentration sowie (b) der N₂O- und N₂-Konzentration bei Verwendung der Modellparameter aus Tabelle 10; Daten von LEFELAAR & WESSEL (1988).

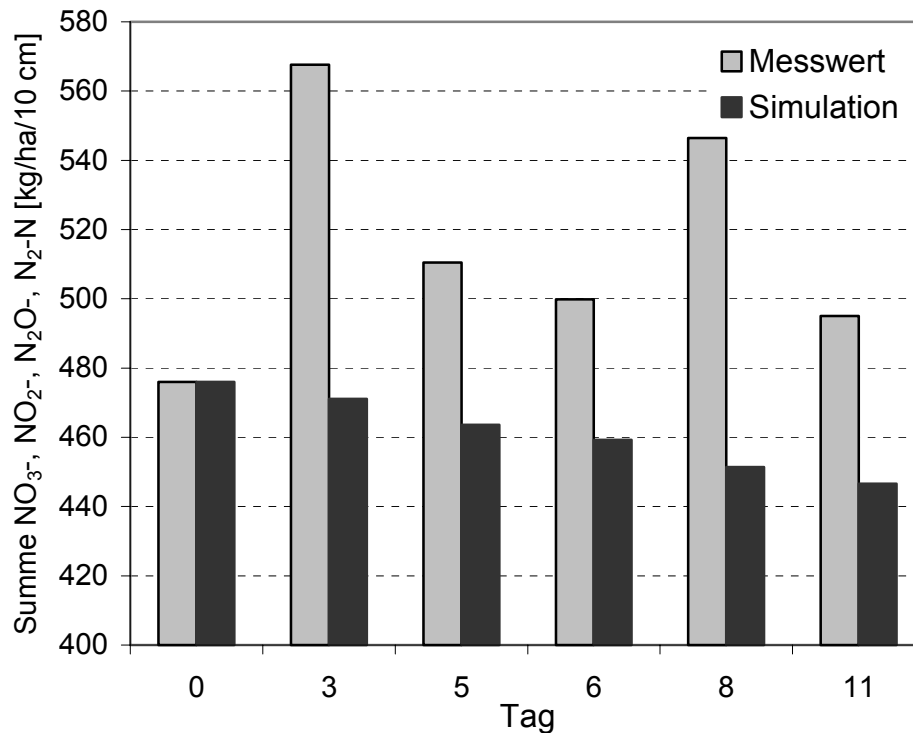


Abbildung 13 Summe der N-Konzentration aus NO_3^- -N, NO_2^- -N, N_2O -N und N_2 -N aus Messwerten und Simulation; Daten von LEFFELAAR & WESSEL (1988).

Eine denkbare Erklärung für die Zunahme der Konzentration der untersuchten N-Verbindungen ist, dass Nitrifikantenspezies auf anaeroben Stoffwechsel umschalten und NO_3^- als Elektronenakzeptor nutzen, um NH_4^+ (hier nicht gemessen) bis zum N_2O zu oxidieren und so zusätzlichen Stickstoff ins denitrifikatorische System einschleusen. Diese sogenannte autotrophe Denitrifikation ist bei der Kalibrierung des heterotrophen Denitrifikationsmodells noch nicht berücksichtigt, sondern wird in Kapitel 2.5.6 beschrieben.

2.5.5 Nitrifikation

Das Nitrifikationsmodell wurde mit Hilfe der Daten eines 112-tägigen Inkubationsexperimentes von SHI & NORTON (2000) kalibriert. Für das Experiment wurde eine Probe aus den oberen 0-15 cm eines lehmigen Ackerbodens (1,4 % C_{org} , 0,016 % N_{org}) mit 50 mg NH_4^+ -N pro kg Boden (entsprechend 75 kg N ha^{-1} 10 cm^{-1}) versetzt und bei 20°C und einem Wassergehalt von 60 % der Feldkapazität inkubiert.

Anfangswerte

Aus dem Experiment liegen Anfangswerte sowie Zeitreihen für die Variablen NH_4^+ und NO_3^- vor. Die Anfangswerte für die restlichen Variablen des Modells mussten sinnvoll abgeschätzt werden.

Für die mikrobielle Biomassekonzentration C_b wird angenommen, dass sie 2,9 % der organischen Bodensubstanz C_{org} umfasst. Das mikrobielle C/N-Verhältnis wird auf 6,0 festgesetzt.

Für die mikrobielle Aktivität r wird ein relativ hoher Anfangswert von 0,07 gewählt, da davon auszugehen ist, dass durch die Vorbehandlung des Bodens mikrobielle Biomasse abgestorben ist, die ein optimales Substrat für ein schnelles Anfangswachstum der überlebenden Mikroorganismen darstellt. Die Anfangskonzentration für den löslichen organischen Kohlenstoff C_s wird auf $80 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ gesetzt, was dem zweifachen Wert dessen entspricht, bei dem sich die C_s -Konzentration bei einem längeren Simulationslauf ohne Substratzugabe einpendelt (0,2 % von C_h). Auch mit dieser Annahme wird vorausgesetzt, dass die Vorbehandlung des Bodens für den Laborversuch zu einer Freisetzung schnell verfügbaren C-Substrates führt.

Über den gesamten Inkubationszeitraum wird laut Messdaten eine Stickstoffmenge von etwa 40 kg N mineralisiert (siehe Abbildung 14). Um die Größe des mittelschnell zersetzbaren organischen Pools (C_d und N_d) abzuschätzen, wird davon ausgegangen, dass dieser Stickstoff zum größten Teil aus der mittelschnell zersetzbaren organischen Substanz N_d stammt. Ein Anfangswert von umgerechnet $30 \text{ kg N}_d \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ ergab nach Ablauf der Inkubationszeit die beste Übereinstimmung zwischen simulierter und gemessener NO_3^- -Konzentration. Im folgenden Schritt wurde der Anfangswert der Kohlenstoffkonzentration C_d dadurch ermittelt, dass das C/N-Verhältnis dieser Fraktion schrittweise verengt wurde ($\text{C/N}=50$ bis $\text{C/N}=5$) und für jeden dieser Schritte eine Parameteroptimierung durchgeführt wurde. Ein weites C/N-Verhältnis von 50 (entsprechend der Reste von Ernteresiduen) ergab so ein Bestimmtheitsmaß von $R^2=0,92$. Eine Verengung auf ein C/N-Verhältnis von 5 führte zu einer entscheidenden Verbesserung der Übereinstimmung zwischen Simulation und Daten, das Bestimmtheitsmaß stieg auf $R^2=0,99$. Das enge C/N-Verhältnis von 5 würde der Annahme entsprechen, dass der Großteil des am Ende nachweisbaren Nitratstickstoffes entweder aus abgestorbener mikrobieller Biomasse mineralisiert wurde, oder dass dem Boden vor der Probennahme organische Substanz mit hohem N-Gehalt zugeführt wurde. Beide Alternativen liegen im Bereich des Möglichen und so wurde der Anfangswert für C_d auf $150 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ gesetzt.

Die Startwerte aller Modellvariablen sind in Tabelle 12 zusammengefasst.

Tabelle 12 Anfangswerte für die Kalibrierung des Nitrifikationsmodells mit Daten von SHI & NORTON (2000). Alle Werte sind, mit Ausnahme der dimensionslosen Größe r , in $\text{kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ angegeben.

| Variable | Startwert | Variable | Startwert |
|----------|-----------|-----------|-----------|
| r | 0,07 | N_b | 100 |
| C_b | 600 | N_d | 30 |
| C_s | 80 | N_h | 2300 |
| C_d | 150 | NH_4 | 64,5 |
| C_h | 20700 | NO_3 | 9,5 |
| CO_2 | 0 | NH_{4s} | 0 |
| | | NO_2^- | 0 |
| | | N_2O | 0 |
| | | N_2 | 0 |

Parameterschätzung

Für die Schätzung der Parameter wurden nur die maximalen Nitrifikationsraten μ_{n1max} und μ_{n2max} freigegeben. Die Michaelis-Menten-Konstante K_{N1} für den ersten Nitrifikationsschritt ($NH_4^+ \rightarrow NO_2^-$) wurde nach MALHI & MCGILL (1982) auf $150 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ festgesetzt. Für die zweite Michaelis-Menten-Konstante K_{N2} wurde ein niedrigerer Wert von $100 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ gewählt, so dass die maximale Umsatzgeschwindigkeit für die Oxidation von NO_2^- zu NO_3^- schon bei geringeren Konzentrationen erreicht wird, als dies für den ersten Nitrifikationsschritt der Fall ist. So wird in Kombination mit einer hohen maximalen Rate μ_{n2max} erreicht, dass die Konzentration an reaktivem NO_2^- im Boden niedrig bleibt. Die optimierten und festgesetzten Parameterwerte für das Nitrifikationsmodell sind in Tabelle 13 zusammengefasst. Die restlichen Parameter des Modells für Mineralisierung/Immobilisierung und mikrobielles Wachstum sowie die mikrobielle Nitratverwertung stammen aus den bereits beschriebenen Parameterschätzungen und wurden nicht verändert.

Tabelle 13 Parameterwerte für das Nitrifikationsmodell.

| Parameter | Schätzer (Varkoeff. [%]) | Anmerkung/Quelle |
|---------------|--------------------------|----------------------------|
| μ_{n1max} | 43,23 (2,16) | Geschätzt |
| μ_{n2max} | 205,77 (15,98) | Geschätzt |
| K_{N1} | 150 | Fix, MALHI & MCGILL (1982) |
| K_{N2} | 100 | Fix |

Tabelle 14 Modelleffizienz ME und Mittlere Fehlerquadratsumme RMSE für das Nitrifikationsmodell.

| | NH_4^+ | NO_3^- |
|------|----------|----------|
| ME | 0,893 | 0,988 |
| RMSE | 8,36 | 4,29 |

Das Ergebnis der Modellkalibrierung ist in Abbildung 14 dargestellt. Die simulierten Verläufe für die NH_4^+ - und NO_3^- -Konzentration werden für die ersten 25 Tage der Inkubation sehr gut nachvollzogen. Erst nach dieser Zeit beginnt das Modell die NH_4^+ -Konzentration zu überschätzen, während der NO_3^- -Verlauf bis zum Ende der Simulationsperiode sehr gut abgebildet wird. Diese gute Übereinstimmung mag daran liegen, dass der Verlauf der NO_3^- -Konzentration nur von zwei Prozessen abhängig ist. Sie wird bestimmt durch die geringe mikrobielle NO_3^- -Aufnahme, die maximal eine Rate von $0,3 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ und Tag erreicht sowie die NO_3^- -Zufuhr durch den Nitrifikationsprozess, dessen Parameter an dieser Stelle kalibriert werden. Die NH_4^+ -Konzentration hängt ebenfalls von der mikrobiellen N-Aufnahme und dem Verlust durch die Nitrifikation ab. Zusätzlich wird sie jedoch in SIMULAT-NC von der Mineralisierung der organischen Bodensubstanz(en) beeinflusst, deren Modellparameter mit Daten eines anderen Bodens abgeschätzt wurden und die hier konstant gehalten wurden. Berücksichtigt man diesen Faktor, ist das Ergebnis der Kalibrierung als sehr zufriedenstellend zu beurteilen.

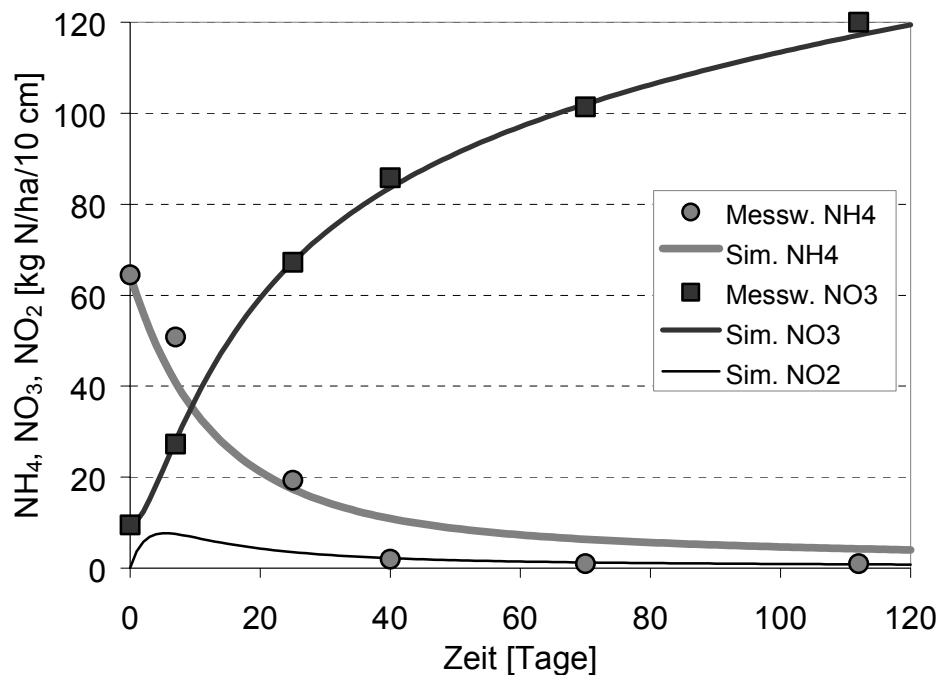


Abbildung 14 Simulierte und gemessene Konzentrationsverläufe von NH_4^+ , NO_2^- und NO_3^- als Ergebnis der Parameterschätzung für das Nitrifikationsmodell; Daten von SHI & NORTON (2000).

2.5.6 Autotrophe Denitrifikation

Das Modell für die autotrophe Denitrifikation musste mit Hilfe von Freilanddaten kalibriert werden, da in der Literatur keine geeigneten Labordaten zu finden waren. Durch KÖBRICH (1995) lag eine geeignete Messreihe vor, die am Untersuchungsstandort des Sonderforschungsbereiches 179 (SFB 179: „Wasser- und Stoffdynamik in Agrarökosystemen“) für die Periode Januar 1992 bis Oktober 1992 aufgenommen wurde. Als Eingabegrößen für das Modell standen neben Emissionsraten für N_2O (in $\text{kg N ha}^{-1} 30 \text{ cm}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$) die NH_4^+ - und NO_3^- -Konzentration der Bodenschicht 0-10 cm zur Verfügung. Außerdem waren Messdaten für Bodenwassergehalt und Temperatur in dieser Bodenschicht verfügbar.

Mit der Verwendung dieser Daten wird angenommen, dass die NO_3^- - und NH_4^+ -Konzentrationen der Bodenschicht 0-10 cm die alleinigen treibenden Kräfte für die Größe der N_2O -Flüsse darstellen. Die N_2O -Freisetzung aus tieferen Bodenschichten kann vernachlässigt werden, da sich nach SCHNEIDER (1991), YOH et al. (1997) und JACINTHE et al. (2002) die Denitrifikationsaktivität in Agrarböden auf die obersten 10-15 cm des Bodens konzentriert. Auch CHRISTENSEN et al. (1990) finden in einer Tiefe von 15-30 cm nur noch 2 % der Aktivität, die in der Schicht 0-15 cm gemessen wurde.

Für die Modellkalibrierung wurden die Daten eines zusammenhängenden Zeitraums von 66 Tagen herangezogen (Tag 150: 30.5.1992 bis Tag 216: 4.8.1992). Dieser Zeitraum ist für die Kalibrierung des Modells für die autotrophe Denitrifikation besonders geeignet, da (1) aufgrund sehr geringer Niederschläge in diesem Sommer der relative Bodenwassergehalt unter dem als kritisch definierten Wert von $\Theta_{\text{rel}}=0,61$ bleibt, ab dem das Modell in den anaeroben Modus übergeht und (2) zu Versuchsbeginn eine Düngergabe in Form von AHL erfolgt, die zu so hohen NH_4^+ -Konzentrationen im Boden führt, dass N_2O -Emissionen gemessen werden konnten.

Da es sich bei den verwendeten Messwerten um Daten aus einem Freilandexperiment mit Pflanzenbewuchs handelt, ohne dass der Stickstoffentzug durch die Pflanzen erfasst wurde, war es nicht sinnvoll das Gesamtmodell mit all seinen organischen Kompartimenten einzusetzen. Vielmehr wurde nur das Nitrifikationsmodell mit den bereits geschätzten Parametern eingesetzt. Die gemessenen NH_4^+ - und NO_3^- -Konzentrationen wurden direkt in das Modell eingelesen, unter der Annahme, dass diese NH_4^+ -Mengen den Nitrifikanten vollständig zur Verfügung standen. Diese Vereinfachungen sind möglich, da in SIMULAT-NC (1) für die Nitrifikation keine eigene Mikroorganismenpopulation angenommen wird, deren Wachstumsdynamik abgeschätzt werden müsste und (2) nur NH_4^+ als limitierendes Substrat für die Nitrifikanten wirksam wird. Auch eine NO_3^- -Verlagerung in tiefere Bodenschichten ist vernachlässigbar, da im Untersuchungszeitraum nur geringe Niederschläge zu verzeichnen waren.

Die landwirtschaftlichen Rahmendaten in diesem Zeitraum waren:

Fruchtart: Winterweizen
 Düngung: 72 kg AHL-N am 5.6.92 (Tag 156)
 Ernte: 31.7.92 (Tag 212)

Anfangswerte

Die Anfangskonzentrationen für NH_4^+ und NO_3^- waren durch die Daten vorgegeben, die Anfangskonzentration für NO_2^- wurde auf null gesetzt. Alle anderen bisher beschriebenen Modellteile wurden nicht berücksichtigt.

Parameterschätzung

Für diesen Modellteil war nur die Geschwindigkeitskonstante k_{nitden} zu schätzen. Der optimierte Wert für k_{nitden} beträgt 0,041 pro Tag (Variationskoeffizient: 3,71 %). Die Modelleffizienz ist mit $\text{ME}=0,04$ nur als sehr mäßig zu bezeichnen und auch der RMSE ist mit $4,9 \text{ g ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$ relativ hoch.

Das Ergebnis der Parameterschätzung ist in Abbildung 15 zu sehen. Aus den gemessenen Werten sind drei Emissionsspitzen für N_2O herauszulesen. Die erste Spitze erfolgt direkt nach der Düngerapplikation (Tag 160), eine zweite am Tag 189 während und als Folge eines Niederschlagsereignisses (siehe Abbildung 15c) und eine dritte am Tag 208 (27.7.92) kurz vor der Ernte. Die Abreife des Bestandes hatte zu diesem Zeitpunkt laut KÖBRICH (1995) bereits begonnen und Mineralisierungstätigkeit bei reduzierter N-Aufnahme der Pflanze führte zu einer Erhöhung der NO_3^- -Konzentration in der betrachteten Bodenschicht.

Die ersten beiden Emissionsspitzen am Tag 160 und am Tag 189 werden von SIMULAT-NC gut nachvollzogen. Dies ist beim dritten Maximum am Tag 208 nicht der Fall. Wenn die beobachtete hohe NO_3^- -Konzentration zu diesem Zeitpunkt auf starke Mineralisierungstätigkeit der Mikroorganismen zurückzuführen ist, wie von KÖBRICH (1995) angegeben, muss dem eine starke Nitrifikationstätigkeit vorausgegangen sein, da das erste Produkt der Mineralisierung organischer Substanz NH_4^+ ist. Da die Nitrifikation unter den gegebenen Bedingungen, d.h. bei annähernd optimalem Wassergehalt und steigenden Temperaturen, sehr schnell abläuft, wird das Zwischenprodukt NH_4^+ durch die Messwerte offenbar nicht erfasst. Demzufolge wird im hier benutzten Modellausschnitt auch kein N_2O gebildet. Allerdings wird bei Einsatz des Gesamtmodells die NH_4^+ -Nachlieferung durch Mineralisierungstätigkeit abgebildet und es kommt über das Zwischenprodukt NO_2^- zu einer N_2O -Entwicklung. Daher kann trotz der nur mäßigen Qualität der Parameterschätzung davon ausgegangen werden, dass SIMULAT-NC die über die autotrophe Denitrifikation gebildete N_2O -Menge zumindest größenordnungsmäßig abschätzen kann.

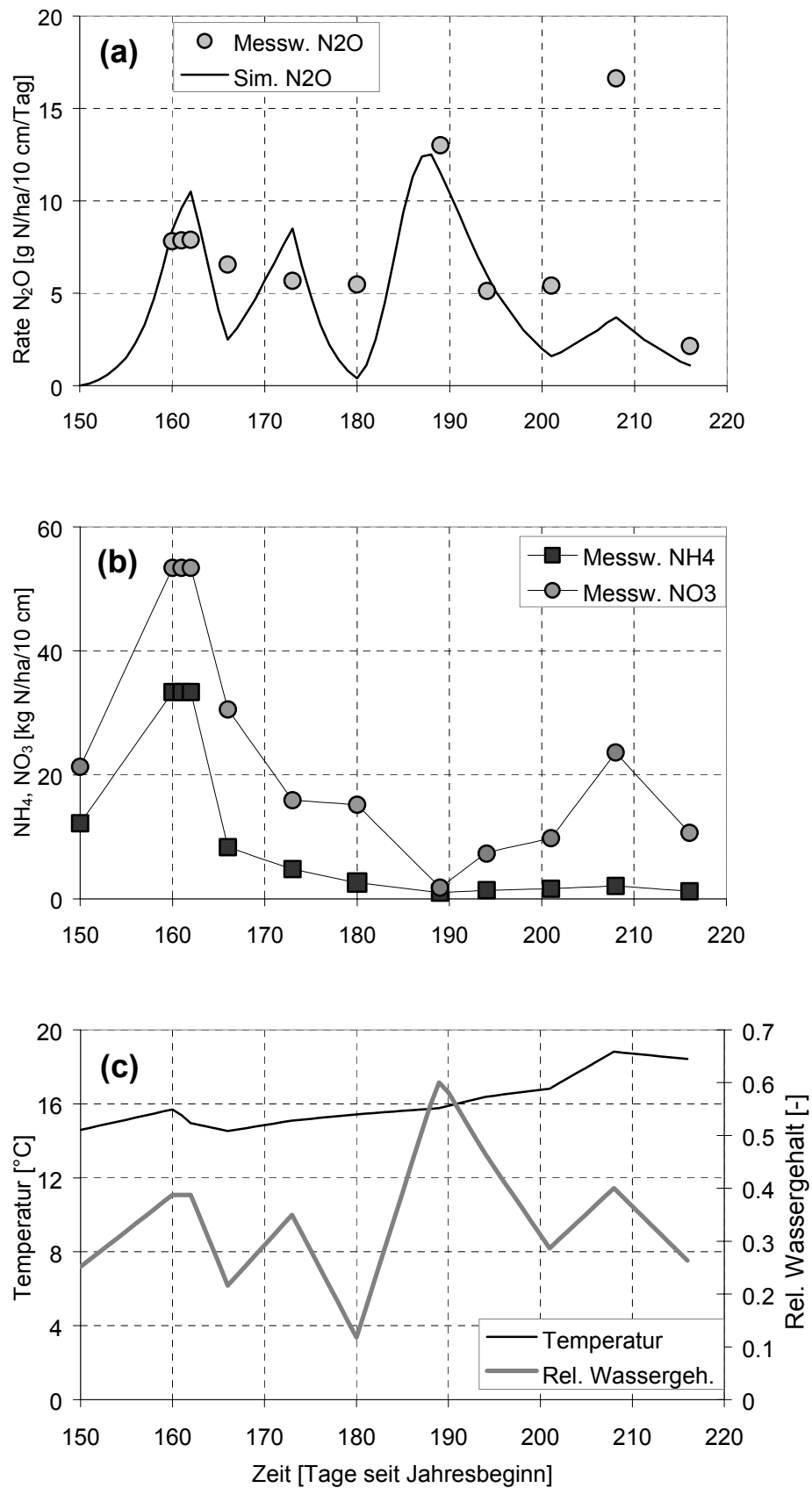


Abbildung 15 Kalibrierung des Modells für die autotrophe Denitrifikation: (a) gemessene und simulierte N_2O -Flussraten, (b) gemessene NH_4^+ - und NO_3^- -Konzentration, (c) Verlauf von Temperatur und relativem Bodenwassergehalt während der Messperiode 30.5.-4.8.1992.

3. QUALITATIVER UND QUANTITATIVER MODELLTEST

Das folgende Kapitel ist in zwei Abschnitte unterteilt: Im ersten dieser beiden Abschnitte wird das Verhalten von SIMULAT-NC anhand von drei Simulationen qualitativ, d.h. ohne Vergleich der simulierten Werte mit gemessenen Daten, untersucht. Da die Raten nahezu aller Stoffumsätze in Form nichtlinearer Differentialgleichungen formuliert sind und das Modell außerdem über die Aktivitätsfunktion r eine Reihe von Rückkopplungen enthält, lässt sich das langfristige Verhalten der Modellvariablen nicht ohne Weiteres vorhersagen. In diesem Abschnitt werden daher drei Simulationen beschrieben, deren Ziel darin besteht, festzustellen, ob alle Modellvariablen absolut und relativ zueinander einen plausiblen Verlauf aufweisen. Für die erste Simulation wird der Simulationszeitraum von den 60 Tagen des Kalibrierungsdatensatzes (SMITH et al., 1986) auf ein Jahr ausgedehnt. Damit wird ein Zeitraum abgedeckt, der für die geplante Freilandanwendung des Modells relevant ist (Kapitel 3.1.1). Mit Hilfe eines zweiten Simulationslaufes werden die Auswirkungen des Konzeptes der mikrobiellen Aktivität r auf die Stickstoffmineralisierung aus der organischen Substanz untersucht (Kapitel 3.1.2). In einem dritten Testlauf werden schließlich die Ergebnisse einer Simulation unter anaeroben Bedingungen den Ergebnissen einer Simulation unter aeroben Bedingungen gegenübergestellt (Kapitel 3.1.3).

Im zweiten Teil des Kapitels werden die Ergebnisse der Validierung des Modells vorgestellt. Das heißt, es erfolgt eine quantitative Überprüfung der Übereinstimmung zwischen simulierten und gemessenen Werten einzelner Modellvariablen mit Hilfe unabhängiger Datensätze. Für die Simulation von Freilandexperimenten, dem eigentlichen Ziel der Modellentwicklung stehen nur Daten in sehr begrenztem Umfang zur Verfügung. Außerdem wird die N-Dynamik von der N-Aufnahme der Pflanze sowie Verlagerungsprozessen, d.h. Prozessen, die nicht Teil der hier vorgestellten Modellentwicklung waren, entscheidend mitgeprägt. Die Modellvalidierung wird daher nicht mit Freilanddaten, sondern mit Hilfe von Daten aus Inkubationsexperimenten im Labor durchgeführt, bei denen diese Prozesse keine Rolle spielen.

Es werden zwei Simulationen präsentiert, die für Ackerböden typische Situationen im Labor nachstellen: Hier handelt es sich zum Einen um ein Experiment, bei dem nach Zufuhr eines stickstoffarmen organischen Substrates in Kombination mit mineralischem Stickstoff die Immobilisierung und nachfolgende Remineralisierung von Stickstoff untersucht wird (Kapitel 3.2.2). Beim zweiten Versuch wird der Zusammenhang zwischen der Mineralisierung von Ernteresiduen und dem Verlauf der N_{\min} -Konzentration im Boden untersucht (Kapitel 3.2.3). Die Modellvalidierung wird abgeschlossen mit einem Mineralisierungsexperiment (Kapitel 3.2.4) mit Bodenproben des Versuchsstandortes, der im abschließenden Freilandexperiment simuliert wird (Kapitel 4).

Allen Datensätzen des quantitativen Modellestes ist gemeinsam, dass sie Zeitreihen für den Verlauf der N_{\min} -Konzentration liefern. Eine abschließende gemeinsame Auswertung aller quantitativen Experimente konzentriert sich daher auf die Qualität der Simulation der N_{\min} -Konzentrationen. Alle in diesem Kapitel beschriebenen Simulationsexperimente wurden mit einer SIMULAT-NC-Version durchgeführt, die mit Hilfe des Programms ModelMaker realisiert wurde.

3.1 Qualitative Modelltests

3.1.1 Langzeitverhalten des Modells

Ein Parametersatz, der eine hervorragende Anpassung der Modellergebnisse an kurzfristige Labordaten von einigen Tagen bis Wochen ergibt, erlaubt noch keine Aussage über die Qualität der Modellergebnisse für längere Zeiträume von Monaten oder Jahren (VAN VEEN et al., 1984). Um daher die Stabilität des Differentialgleichungssystems mit dem verwendeten Parametersatz sowie die langfristige Dynamik aller Modellvariablen zu testen, wurde eine Simulation über 365 Tage durchgeführt. Die Anfangswerte für die Modellvariablen, die Parameterwerte sowie die Temperatur und der Bodenwassergehalt entsprechen dem Experiment für die Kalibrierung des Modells für Mineralisierung/Immobilisierung der organischen Substanz und mikrobielles Wachstum (siehe Kapitel 2.5). Der Simulationszeitraum des dort beschriebenen Experimentes wurde ohne Substratzugabe von 60 auf 365 Tage ausgedehnt.

In Tabelle 15 sind die Konzentrationen aller Modellkomponenten nach 365 Tagen im Vergleich zu ihrem Anfangswert aufgeführt. So nimmt die Konzentration an mikrobieller Biomasse C_b (bei Verwendung der Parameterwerte aus Kapitel 2.5) innerhalb von 365 Tagen auf 51 % des Ursprungswertes ab, was einer sichtbaren Sterberate von 0,13 % pro Tag entspricht. HARDEN (1998) fand bei einer 235-tägigen Inkubation ohne Substratzufuhr eine Sterberate von 0,024 % pro Tag, allerdings bei einer Inkubationstemperatur von nur 12°C, was die mikrobielle Sterberate in seinem Experiment herabgesetzt haben dürfte. Die simulierten Werte erscheinen damit plausibel. Die Fraktion C_d der organischen Bodensubstanz nimmt in diesem Zeitraum auf 14 % ab, was angesichts der optimalen Temperatur- und Bodenwasserbedingungen ebenfalls plausibel erscheint. Der Konzentrationsrückgang der organischen N-Komponenten ist durchweg geringer als der der entsprechenden C-Komponenten, da CO_2 dem Stoffkreislauf entzogen wird, während das Produkt der N-Mineralisierung im Laufe des Simulationszeitraums zum größten Teil in den organischen Pool zurückkehrt. So verengt sich das C_d/N_d -Verhältnis im Laufe eines Jahres von 50 auf 8,1 und nähert sich damit größenordnungsmäßig dem C/N-Verhältnis der mikrobiellen Biomasse an. Das C/N-Verhältnis der mikrobiellen Biomasse sinkt von anfänglich 6,0 auf 4,2. Der Endwert stimmt überein mit Daten von JOERGENSEN & BROOKES (1990), die ein mikrobielles C/N-Verhältnis von 4,2 berichten, oder auch JOERGENSEN et al. (1992), die für mitteleuropäische Ackerböden ein durchschnittliches mikrobielles C/N-Verhältnis von 4,7 angeben.

Tabelle 15 Startwert und Endwert der Modellvariablen nach einer 365-tägigen aeroben Simulation ohne Substratzufuhr bei konstanten Temperatur- und Feuchtebedingungen.

| Variable | Startwert [-] bzw. [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | Endwert | Variable | Startwert [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | Endwert |
|----------|--|---------|-----------|---|---------|
| r | 0,07 | 0,02 | N_b | 148 | 107 |
| C_b | 885 | 454 | N_d | 10 | 9 |
| C_s | 120 | 63 | N_h | 2010 | 1789 |
| C_d | 510 | 73 | N_{min} | 15 | 115 |
| C_h | 30345 | 28963 | | | |
| CO_2 | 89 | 1943 | | | |

Dieser Versuch zeigt, dass das Modell mit der gewählten Anzahl an Zustandsvariablen sowie der vorliegenden Kombination aus Anfangs- und Parameterwerten über einen längeren Zeitraum einen stabilen Verlauf aufweist und zu realistischen Werten führt. Diese Stabilität über längere Zeiträume sollte in Experimenten mit SIMULAT-NC in Vorversuchen abgesichert werden, wenn kein Integrationsverfahren zur Verfügung steht, das mit steifen Differentialgleichungen umgehen kann.

3.1.2 Einfluss der mikrobiellen Aktivität r auf die N-Mineralisierung

Ein zentraler Aspekt in SIMULAT-NC ist die Beschreibung der Geschwindigkeit der Stoffdurchsätze im Boden über das mikrobielle Wachstum und Absterben. Die Hauptannahme des Modells besteht darin, dass nur der aktive Anteil der Mikroorganismenpopulation an Stoffumsätzen, wie z.B. der Festlegung von N_{min} in die organische Bodensubstanz, oder im Gegenzug der Mineralisierung von N_{min} aus der organischen Substanz, beteiligt ist.

Die Auswirkung, die die Dynamik der mikrobiellen Aktivität r auf die Geschwindigkeit der Stickstoffmineralisierung aus der organischen Substanz hat, lässt sich am besten mit Hilfe eines Simulationsexperimentes mit einer Modellvariante ohne r und einer Variante mit der mikrobiellen Aktivität r verdeutlichen. Bei diesem Experiment wurde einem Boden organische Substanz zugeführt, die 2000 kg C ha⁻¹ 10 cm⁻¹ Kohlenstoff entspricht. Die organische Substanz weist ein C/N-Verhältnis von 80 auf, d.h. einen N-Anteil, wie er oft bei Getreidestroh gefunden wird. Die C-Menge wurde verteilt auf den labilen Kohlenstoffpool C_d und den löslichen Kohlenstoffpool C_s . Der C_s -Anteil, der einen direkten Einfluss auf die mikrobielle Aktivität r ausübt, wurde zwischen 10 % und 30 % der C-Gesamtzufuhr variiert. Die Anfangswerte für die verbleibenden Variablen sowie die Parameterwerte entsprechen denen für die Kalibrierung des Modells mit Daten von SMITH et al. (1986) (siehe Kapitel 2.2). Dasselbe Simulationsexperiment wurde mit einer Modellvariante durchgeführt, aus deren Gleichungssystem die Variable r entfernt wurde. Die Parameter dieser Modellvariante wurden mit Hilfe des Datensatzes von SMITH et al. (1986) neu kalibriert. Anschließend erfolgte die Simulation mit beiden Modellvarianten jeweils über einen Zeitraum von 365 Tagen.

Abbildung 16 zeigt den Verlauf der Mineralisierungsrate von N_{min} aus dem stabilen organischen Stickstoffpool (N_h) als Folge der Zufuhr von organischer Substanz mit unterschiedlichen Anteilen an löslichem Kohlenstoff C_s . Der Kurvenverlauf macht deutlich, dass das Modell mit Hilfe der mikrobiellen Aktivität r den sogenannten „Priming Effect“ sehr viel prägnanter abbilden kann, als die Modellversion ohne die Variable r . Unter dem "Priming Effect" ist nach KUZUYAKOV et al. (2000) eine Beschleunigung (bzw. Verlangsamung) beim Abbau, nicht nur der frisch zugeführten, sondern auch der stabilen organischen Bodensubstanz zu verstehen, die durch steigende (bzw. sinkende) Aktivität und/oder Konzentration der mikrobiellen Biomasse hervorgerufen wird. Auch bei der Modellvariante ohne r führt das durch C_s induzierte Mikroorganismenwachstum zu einem verstärkten Abbau der organischen Substanz, allerdings in einem sehr viel geringeren Umfang als in der Modellvariante, in der sowohl die Größe der Mikroorganismenpopulation (C_b) als auch ihr aktiver Anteil berücksichtigt wird. Der Umstand, dass nicht nur die Biomassekonzentration auf die Umsatzraten einwirkt, ist im Hinblick auf den Einsatz des Modells unter Freilandbedingungen sehr wichtig. So weist die Konzentration an mikrobiellem Kohlenstoff im Boden nach Untersuchungen von JOERGENSEN et al. (1994) im Laufe eines Jahres unter Freilandbedingungen nur geringe, nicht signifikante Schwankungen auf. Auch HARDEN (1998) und WIDMER (1993) fanden bei ihren Messungen unter Freilandbedingungen maximal 30 % Abweichung von der mittleren jährlichen Biomasse-C-Konzentration. Durch das Konzept der mikrobiellen Aktivität r ist die Möglichkeit gegeben, trotz nur geringer Variation der Biomassekonzentration ein weites Spektrum an Abbaugeschwindigkeiten für die organische Substanz zu erreichen. So variiert die Geschwindigkeit der N-Mineralisierung aus dem stabilen organischen Pool für das Modell mit r um den Faktor sechs ($0,1 - 0,6 \text{ kg N ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$), während die Mineralisierungsrate bei der Modellvariante ohne r , unter ansonsten gleichen Bedingungen, noch nicht einmal um den Faktor zwei variiert ($0,14 - 0,08 \text{ kg N ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$). Das heißt, obwohl beide Modellvarianten mit einem Datensatz kalibriert wurden, der ein Überdauerungsstadium der Mikroorganismen im Boden und damit eine Verlangsamung aller Abbauprozesse anstrebte, ist nur die Variante mit der mikrobiellen Aktivität r in der Lage, sowohl die Beschleunigung von Prozessen durch Substratzugabe als auch die Ergebnisse der Inkubationsexperimente von SMITH et al. (1986) abzubilden.

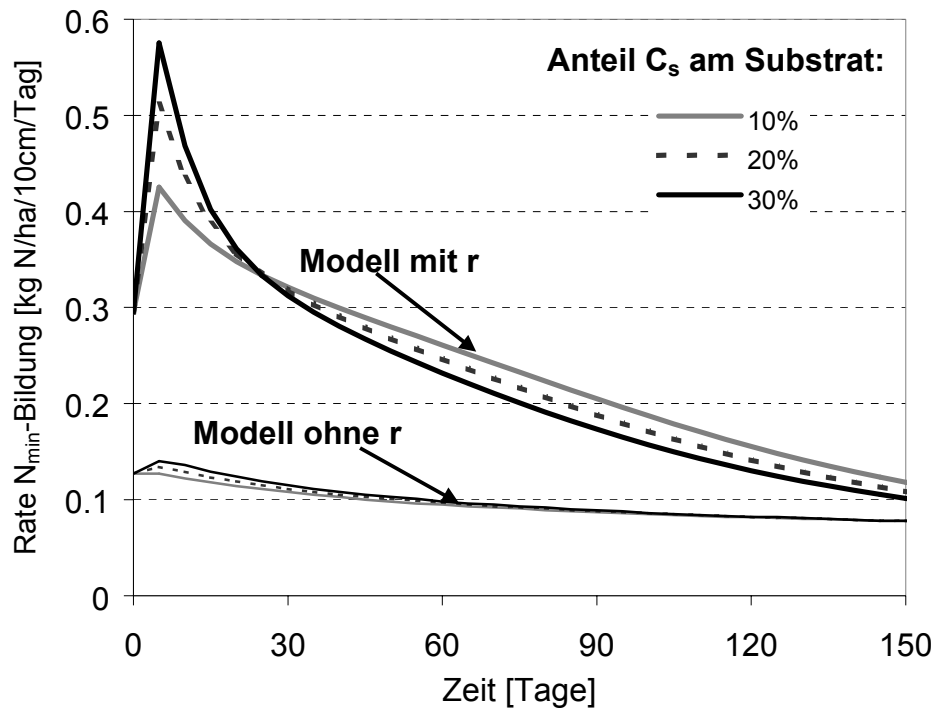


Abbildung 16 Auswirkungen der mikrobiellen Aktivität r auf die Rate der N-Mineralisierung aus der stabilen Fraktion der organischen Bodensubstanz (N_h) bei unterschiedlicher Substratqualität.

Weiterhin zeigt Abbildung 16, dass das Modell durch das Konzept der mikrobiellen Aktivität sensitiv auf die Qualität des zugegebenen Substrates reagiert, wenn die Substratqualität vereinfachend mit dem Anteil an löslichem organischen Kohlenstoff C_s gleichgesetzt wird. Die Geschwindigkeit der N-Mineralisierung bei der Modellvariante mit r ist bei Substrat mit hohem C_s -Anteil um bis zu 35 % höher als bei Substraten mit geringerem C_s -Anteil. Bei der Modellvariante ohne r findet sich maximal ein Unterschied von 10 %. Diese Sensitivität ist insbesondere für Zeiten kontinuierlicher, aber geringer C_s -Zufuhr von Bedeutung, wie sie z.B. durch die Wurzelexsudation während der Vegetationsperiode auftritt. Das heißt, durch die Rückkopplung zwischen der C_s -Konzentration im Boden und den Abbauraten der organischen Substanz, die über die mikrobielle Aktivität r realisiert wird, lässt sich ohne weitere Unterteilung der organischen Kompartimente ein weites Spektrum von Halbwertszeiten bei der Mineralisierung der organischen Substanz erreichen.

3.1.3 Stoffumsätze unter aeroben und anaeroben Bedingungen

In diesem Abschnitt wird bei einem weiteren Simulationsexperiment das Verhalten der Modellvariablen unter anaeroben Bedingungen dem Verhalten der Modellvariablen unter aeroben Bedingungen gegenübergestellt. Ziel der Simulation ist es, die Plausibilität im Verlauf der Gesamtheit der Modellvariablen unter anaeroben Bedingungen zu überprüfen und außerdem das Modellverhalten des anaeroben Modells bei Zugabe leicht verwertbaren Substrates zu testen. Der Hintergrund dieses Experimentes ist, dass die N-Umsätze bei der in Mitteleuropa typischen Bewirtschaftungspraxis außerhalb der Vegetationsperiode in erster Linie durch die

mikrobielle Biomasse (sowie Stoffverlagerungen mit der Wasserbewegung) bestimmt werden. Da in diesem Zeitraum, d.h. vor allem im Herbst und Winter, der Boden häufig und über längere Zeiträume einen hohen Wassergehalt aufweist, ist es wichtig, abzuschätzen, welcher Anteil des mineralischen N unter diesen Bedingungen als N_2O und N_2 in die Atmosphäre entweicht, bzw. als NO_3^- im Boden verbleibt und damit potenziell in das Grundwasser auswaschbar ist. Da dem Boden im Spätsommer und Herbst durch Zufuhr von Ernteresiduen und/oder Wirtschaftsdünger oft große Mengen an Stickstoff und organischer Substanz zugeführt werden, wird diese Substratzugabe auch im Simulationsexperiment vorgenommen.

Die Bedingungen für beide Simulationsläufe entsprechen dem Experiment von LEFFELAAR & WESSEL (1988), so dass die Ergebnisse des anaeroben Modellexperimentes für die Stickoxide im Wesentlichen gemessenen Werten entsprechen. Zu Beginn erfolgt bei beiden, also für den aeroben und den anaeroben Fall, eine Zugabe von sowohl löslichem Kohlenstoff C_s ($780 \text{ kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$) als auch mineralischem Stickstoff in Form von NO_3^- -N ($473 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$). Die Temperatur beträgt $22,7^\circ\text{C}$ und wird konstant gehalten. Der Simulationszeitraum erstreckt sich über 120 Tage. Für beide Simulationsläufe werden, mit Ausnahme der mikrobiellen Aktivität (r für aerobe bzw. r_{den} für anaerobe Verhältnisse), die gleichen Anfangswerte der Zustandsvariablen verwendet, wie bei der Kalibrierung des Modells für die heterotrophe Denitrifikation (siehe Kapitel 2.5).

Die Unterschiede zwischen aerober und anaerober Simulation bestehen in den folgenden vier Punkten:

1. Das Nitrifikationsmodell ist nur unter aeroben Bedingungen aktiv;
2. der relative Bodenwassergehalt wird für den aeroben Simulationslauf auf 0,59 und für den anaeroben Lauf auf 1,0 gesetzt, wird also für beide Läufe als nicht limitierender Witterungsfaktor angenommen;
3. eine Veratmung, d.h. dissimilatorische Verwertung der Stickoxide NO_3^- , NO_2^- und N_2O findet unter aeroben Bedingungen nicht statt;
4. für die Simulation unter Ausschluss von Sauerstoff wird die mikrobielle Aktivität r für aerobe Bedingungen durch die mikrobielle Aktivität für anaerobe Bedingungen r_{den} ersetzt. Sowohl r als auch r_{den} sind in Abhängigkeit von Temperatur und Wassergehalt sowie mikrobiell direkt verwertbarem C- und N-Substrat formuliert. Der Unterschied zwischen r und r_{den} besteht zum Einen in der unterschiedlichen Parametrisierung der jeweiligen Funktionen und zum Anderen darin, dass N_2O und NO_2^- unter aeroben Bedingungen nicht mehr in die Steuerfunktion $R(N_{min})$ der mikrobiellen Aktivität r eingehen.

Da die zeitliche Dynamik der Modellvariablen durch die anfängliche Versorgung mit löslichem Kohlenstoff (C_s) bestimmt wird und diese Dynamik innerhalb von 15 Tagen abklingt, werden hier nur die Ergebnisse der ersten 20 Tage dargestellt und diskutiert. Nach Ablauf dieses Zeitraumes sinken sämtliche Umsatzraten, aufgrund der Verarmung an leicht verfügbarem C- bzw. N-Substrat und damit zurückgehender mikrobieller Aktivität. Die zeitlichen Verläufe aller Modellvariablen sind für anaerobe und aerobe Verhältnisse in Abbildung 17 darge-

stellt. Sie werden im folgenden Text vor allem hinsichtlich der Unterschiede in ihrer Dynamik unter aeroben und anaeroben Bedingungen diskutiert.

Wie aus Abbildung 17a zu ersehen ist, erreicht die mikrobielle Aktivität r_{den} unter anaeroben Bedingungen nur ein Maximum von 0,07, d.h. die Aktivität der mikrobiellen Biomasse beträgt maximal 7 %. Im Vergleich dazu führt eine als optimal angenommene Sauerstoffversorgung unter den gleichen Anfangsbedingungen zu einem Anstieg der Aktivität r bis auf 0,26. Als limitierender Faktor wirkt im anaeroben Modell die Verarmung des Bodens an Stickoxiden, da NO_3^- sehr schnell abgebaut und innerhalb von 10 Tagen schon zur Hälfte zu N_2 veratmet ist (siehe Abbildung 17n). Unter aeroben Bedingungen lässt dagegen der schnelle Abbau des löslichen Kohlenstoffes C_s eine Mangelsituation entstehen und die mikrobielle Aktivität innerhalb von 14 Tagen auf das Anfangsniveau zurückfallen.

Unter anaeroben Bedingungen werden bis zum 20. Tag der Simulation nur 38 % der CO_2 -Menge emittiert, die unter aeroben Bedingungen freigesetzt werden (siehe Abbildung 17b). Die Rate der CO_2 -Entwicklung erreicht unter anaeroben Bedingungen maximal $33 \text{ kg C ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$. Sie liegt damit bei 23 % der maximalen Mineralisierungsrate unter aeroben Bedingungen ($144 \text{ kg C ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$). Dies entspricht den Beobachtungen von DEVEVRE & HORWATH (2000), die unter anaeroben Bedingungen einen Rückgang der Mineralisierungsrate um 75 % beobachteten. Da die mikrobielle Aktivität aufgrund der Verarmung des Bodens an leicht verfügbarem C- bzw. N-Substrat geringer wird, nimmt die Mineralisierungsrate sowohl unter anaeroben als auch unter aeroben Verhältnissen gegen Ende der Simulationsperiode ab.

Beim Abbau der löslichen Kohlenstofffraktion (C_s) steigt die Halbwertszeit, d.h. die Zeit, bis zu der 50 % der ursprünglichen Menge abgebaut sind, steigt von 2,5 Tagen für aerobe Bedingungen auf 11,5 Tage unter anaeroben Bedingungen (siehe Abbildung 17c). Aufgrund des geringeren Anteils der aktiven Anaerobier an der mikrobiellen Gesamtpopulation und der damit geringeren mikrobiellen Aktivität r_{den} , wird der Abbau der löslichen Kohlenstofffraktion bei Sauerstoffmangel merklich verlangsamt; es findet aber noch immer eine nennenswerte C_s -Verwertung statt. Diese anaerobe C-Verwertung kann bei unzureichender Versorgung des Bodens mit organischem Material durchaus zu einer C-Limitierung der Denitrifikation führen. Dieser Umstand kann bei der Denitrifikation in tieferen Bodenschichten eine wichtige Rolle spielen. Nitrat, das sich bereits unterhalb der Wurzelzone befindet und damit leicht in das Grundwasser gelangen könnte, könnte bei ausreichender C-Konzentration in der betrachteten Bodenschicht in gasförmige N-Verbindungen umgewandelt werden. Eine Gefährdung des Grundwassers durch NO_3^- -Kontaminierung wäre damit vermindert. In SIMULAT-NC werden diese beiden Prozesse (NO_3^- -Verlagerung und denitrifikatorische NO_3^- -Verwertung) berücksichtigt, da eine Zufuhr von löslichem Kohlenstoff über den Stofftransport in tiefere Bodenschichten berechnet wird und so die Denitrifikation auch in tieferen Bodenschichten ablaufen kann.

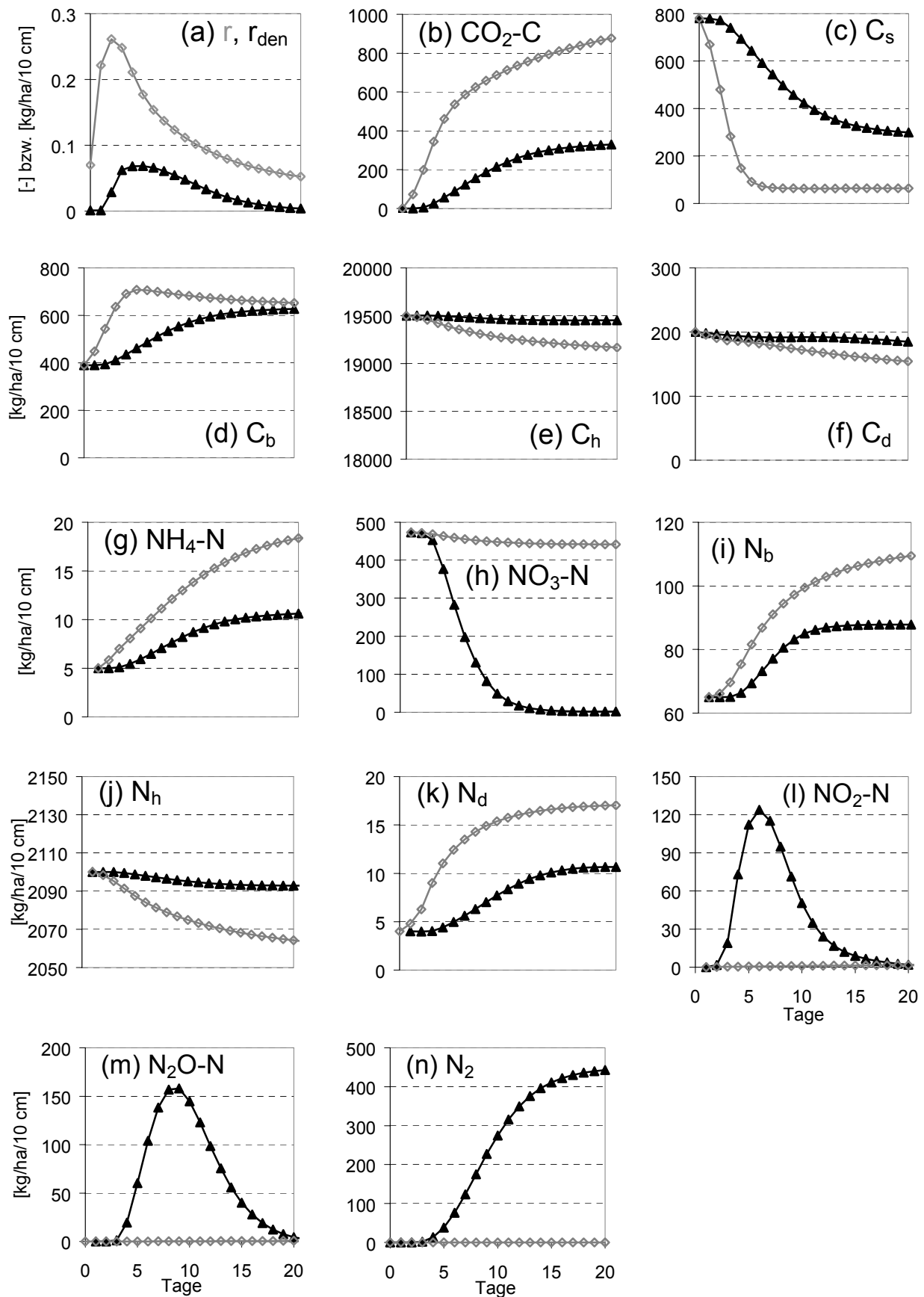


Abbildung 17 Simulierter Verlauf aller stofflichen Modellvariablen (in $kg\ ha^{-1}\ 10\ cm^{-1}$) sowie der mikrobiellen Aktivität r_{den} und r (dimensionslos) unter anaeroben (schwarze Kurven) und unter aeroben Bedingungen (graue Kurven).

Wie aus Abbildung 17e zu ersehen ist, wird der größte Pool organischer Substanz (C_h) im anaeroben Modell mit einer niedrigeren und gleichbleibenderen Rate abgebaut als im aeroben Modell, in dem, aufgrund der hohen mikrobiellen Aktivität zu Versuchsbeginn Abbauraten bis zu $35 \text{ kg C ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$ erreicht werden („Priming-Effect“). Die mikrobielle Aktivität r_{den} geht dagegen unter anaeroben Bedingungen langsamer zurück, als es die schnelle Abnahme der Nitratkonzentration vermuten lässt. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Konzentration der N-Substrate NO_2^- und N_2O , die unter anaeroben Bedingungen als Steuergrößen in die mikrobielle Aktivität r_{den} eingehen, erst in Folge der Nitratverwertung gebildet werden. Daraus ergibt sich, dass r_{den} nur langsam abnimmt, so dass keine schnellen Änderungen der Abbauraten für die organische Substanz, d.h. ein fast vollständiges Verschwinden des „Priming-Effectes“ zu beobachten ist. Letzterer ist dagegen unter aeroben Bedingungen für die organischen Stoffkompartimente C_h und N_h stark ausgeprägt (siehe Abbildung 17j).

Die labile organische C-Fraktion C_d zeigt unter anaeroben Bedingungen einen geringeren Abbau (7,5 %) als unter aeroben, wo sich die Konzentration nach 20 Tagen bereits um die dreifache Menge (23 %) verringert hat (siehe Abbildung 17f). Im Gegensatz zum C-Anteil dieser organischen Fraktion vervierfacht sich die N_d -Konzentration unter aeroben Bedingungen, während die N_d -Konzentration unter anaeroben Bedingungen am Tag 20 lediglich das 2,7-fache der Ausgangskonzentration beträgt (siehe Abbildung 17k). Durch die gegenläufige Dynamik des C- und N-Anteils verengt sich das C/N-Verhältnis der labilen organischen Fraktion von 50 zu Simulationsbeginn auf 17 unter anaeroben und 9 unter aeroben Verhältnissen. Die zunehmende Konzentration an labilem organischen N (N_d) spiegelt die unterschiedliche Geschwindigkeit des mikrobiellen N-Durchsatzes unter aeroben und anaeroben Bedingungen wider, da vor allem der N-Anteil der abgestorbenen mikrobiellen Biomasse als Quelle für diesen organischen Pool fungiert. Innerhalb der ersten fünf Tage fließen dem N_d -Pool aus der mikrobiellen Biomasse unter aeroben Bedingungen bis zu $1,7 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$ zu. Anaerobe Bedingungen reduzieren diese Menge auf weniger als ein Drittel ($0,4 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$).

Die mikrobielle Biomasse (C_b) wächst innerhalb von 20 Tagen sowohl unter anaeroben als auch aeroben Bedingungen auf 160 % der Anfangsbiomasse an (siehe Abbildung 17d). Diese kräftige Zunahme an mikrobiellem Kohlenstoff stimmt überein mit Beobachtungen von DEVEVRE & HORWATH (2000), die bei Zugabe von Reisstroh zu Bodenproben, sowohl unter anaeroben als auch unter aeroben Bedingungen, sogar eine Verdoppelung der mikrobiellen Biomasse beobachteten. Der Biomassezuwachs in ihrem Versuch ist wahrscheinlich höher, da dem Boden im Vergleich zum hier beschriebenen Simulationsexperiment die 5,5-fache Menge an verwertbarem C-Substrat zugeführt wurde. In der Simulation verläuft das Wachstum bei Abwesenheit von Sauerstoff allerdings deutlich langsamer und kontinuierlicher als unter aeroben Bedingungen. Unter aeroben Verhältnissen wächst die Biomasse anfänglich sehr stark, erreicht höhere Werte als unter anaeroben Bedingungen und beginnt dann abzusterben. Diese unterschiedliche Dynamik, hervorgerufen durch den unterschiedlichen Verlauf der mikrobiellen Aktivität, hat Auswirkungen auf die Immobilisierung des mineralischen Stickstoffes: Der

Biomassestickstoff N_b wächst unter anaeroben Bedingungen auf 135 % der Ausgangskonzentration, während eine ausreichende Sauerstoffversorgung N_b ihn sogar auf 168 % der Ausgangsmenge ansteigen lässt (siehe Abbildung 17i). Das C/N-Verhältnis der Gesamtbiomasse steigt unter anaeroben Bedingungen aufgrund des niedrigeren aktiven Biomasseanteils (r_{den}) konstant auf 7,1 an. Unter aeroben Bedingungen führt dagegen die anfänglich niedrige NH_4^+ -Konzentration von weniger als $10 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ zu einem zwischenzeitlichen Anstieg des mikrobiellen C/N-Verhältnisses auf 8,5 (Tag 4), um sich bis zum Tag 20 wieder auf den Anfangswert 6,0 einzupendeln. Die anfänglich hohe Nitratkonzentration spielt hier nur eine untergeordnete Rolle, da NO_3^- in SIMULAT-NC von Mikroorganismen nur in geringem Maße für den Aufbau von Biomasse verwertet wird.

Nitrat wird in der anaeroben Simulation im Wesentlichen als Energiequelle (Elektronenakzeptor) sowie in geringem Umfang auch für den Aufbau von mikrobieller Biomasse verbraucht. Sein Abbau ist dementsprechend schnell (siehe Abbildung 17h). Da die NO_3^- -Verwertung als Energiequelle unter aeroben Bedingungen wegfällt und die Verwertung für den Biomasseaufbau auch hier nur gering ist, geht die Nitratkonzentration in der aeroben Simulation deutlich langsamer zurück ($-32 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ in 20 Tagen). An dieser Stelle muss allerdings angemerkt werden, dass die Anfangskonzentration an Nitrat sehr viel höher ist, als es der gängigen Düngepraxis entspricht und damit eventuell einhergehende toxische Nebeneffekte nicht berücksichtigt werden.

Der zeitliche Verlauf der Ammoniumkonzentration im Boden ergibt sich in SIMULAT-NC aus dem Wechselspiel von fünf Prozessen: (1) der N-Aufnahme durch die mikrobielle Biomasse, (2) der NH_4^+ -Fixierung in der Bodenmatrix, (3) der Nitrifikation über NO_2^- zu NO_3^- (nur unter aeroben Bedingungen), (4) der N-Mineralisierung aus der organischen Bodensubstanz (N_d und N_h) und (5) der N-Mineralisierung aus der abgestorbenen mikrobiellen Biomasse. Entsprechend schwierig ist der zeitliche Verlauf der daraus resultierenden Konzentration zu interpretieren. Wie aus Abbildung 17g deutlich wird, findet sowohl in der aeroben als auch in der anaeroben Simulation eine Netto-Mineralisierung von NH_4^+ statt. Die Menge des freigesetzten NH_4^+ erreicht unter anaeroben Bedingungen eine Größenordnung vergleichbar der des Abbaus der stabilen organischen Bodensubstanz N_h . Unter aeroben Bedingungen wird ein Teil des aus der organischen Substanz mineralisierten Stickstoffes sehr schnell nitrifiziert, so dass es in der Bodenlösung nicht als NH_4^+ auffindbar ist. Im Wesentlichen wird der Konzentrationsverlauf des Ammoniums von der Größe der Flussraten $NH_4^+ \rightarrow N_b \rightarrow N_d \rightarrow NH_4^+$ bestimmt, die wiederum von der mikrobiellen Aktivität r bzw. r_{den} abhängig sind.

Die in Abbildung 17l, m und n dargestellte Entwicklung der N_2 -, N_2O - und NO_2^- -Konzentration unter anaeroben Bedingungen entspricht dem Datenverlauf des Experimentes für die Kalibrierung der heterotrophen Denitrifikation. Die kumulierte N_2O -Entwicklung während der autotrophen Denitrifikation, d.h. unter aeroben Bedingungen beläuft sich nach 20 Tagen auf $0,7 \text{ kg N}_2O\text{-N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$. Die NO_2^- -Konzentration durchläuft unter aeroben Bedingungen, d.h. bei ungestört ablaufender Nitrifikation, ein Maximum von $1,6 \text{ kg NO}_2^-\text{-N}$

$\text{ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$, was angesichts der niedrigen NH_4^+ -Konzentration durchaus plausibel erscheint.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass der anaerobe Zustand im Modell zwar einen Großteil der Umsetzungsprozesse verlangsamt, sie aber nicht zum Stillstand bringt. Die Ergebnisse des anaeroben Modells im Verhältnis zu den Ergebnissen des aeroben Modells scheinen durchaus plausibel zu sein. Da die Datenlage in Bezug auf vergleichende Experimente für die mikrobielle C- und N-Dynamik unter aeroben und anaeroben Bedingungen eher unbefriedigend ist, lassen sich hierzu keine abgesicherten Aussagen machen. Die Einführung einer zweiten mikrobiellen Aktivität r_{den} für die Denitrifikantenpopulation scheint aber eine einfache und zielführende Möglichkeit zu sein, mikrobielle Umsetzungsprozesse auf konsistente Weise unter aeroben und anaeroben Bedingungen abzubilden.

3.2 Quantitative Modelltests – Modellvalidierung

Der Mineralisierungs- und Immobilisierungsteil des Modells SIMULAT-NC wurde mit einem Datensatz aus einem Experiment kalibriert, das die Einstellung eines stationären Zustandes zum Ziel hatte. Die gemessenen Werte aus diesem Experiment konnten sehr gut nachvollzogen werden. Auch ist das Modell durch die Variabilität der mikrobiellen Aktivität r prinzipiell in der Lage schnelle Dynamiken nachzubilden, wie die Simulation des „Priming-Effect“ in Kapitel 3.1.2 gezeigt hat. Nun stellt sich jedoch die Frage, ob das Modell auch die N_{min} -Dynamik landwirtschaftlich genutzter Böden unter Freilandbedingungen quantitativ zufriedenstellend nachbilden kann. Agrarökosysteme zeichnen sich gerade nicht durch die Einstellung eines Gleichgewichtszustandes aus (VAN VEEN et al., 1984), sondern sind, bei der hier betrachteten Zeitskala von Monaten bis wenigen Jahren, durch eine Vielzahl von Systemstörungen gekennzeichnet. Bei der Auswahl unabhängiger Datensätze für die Modellvalidierung wurden daher vor allem solche Datensätze berücksichtigt, die die Auswirkungen solcher „Störungen“ des Systems, wie z.B. N-Düngergaben, oder die Zufuhr von organischer Substanz auf den Konzentrationsverlauf des mineralischen Stickstoffs untersuchen.

Unter dem Begriff Modellvalidierung wird im Allgemeinen der Gültigkeitstest eines Modells mit Hilfe eines unabhängigen Datensatzes verstanden. Bei dieser Art von Test wird das Modell als eine festgelegte Einheit von Funktionsgleichungen, Parameter- sowie Startwerten für die Zustandsvariablen definiert. Bei der Simulation mehrerer Böden mit unterschiedlicher Zusammensetzung und landwirtschaftlicher Vorgeschichte ist es allerdings wahrscheinlich, dass (1) die Startwerte für die Modellvariablen variieren und dass (2) im Modell Prozesse nicht oder stark vereinfacht abgebildet sind, die in diesen Böden eine wichtigere Rolle spielen als in den Böden, die für die Modellkalibrierung genutzt wurden. Eine Variation der Startwerte sowie einzelner Modellparameter scheint daher in einem weiteren Modelltest angemessen, um eine bessere Übereinstimmung zwischen Simulation und Messwerten zu erreichen und auf diesem Wege offene Fragen und Schwachstellen des Modells zu identifizieren.

Der Modelltest besteht somit für jeden Datensatz aus insgesamt drei Simulationsläufen:

Simulation 1: Der Modelllauf wird unter Verwendung des aus der Kalibrierung stammenden Parametersatzes (Kapitel 2.5) sowie mit Standardwerten für die Startwerte der nicht gemessenen Modellvariablen durchgeführt (Modellvalidierung im strengen Sinne).

Simulation 2: Bei diesem Modelllauf werden die relevanten Startwerte innerhalb plausibler Grenzen neu geschätzt, um die Übereinstimmung zwischen Daten und Simulation zu verbessern. Die Parameterwerte bleiben unverändert.

Simulation 3: In einem dritten Modelllauf werden einzelne Parameter des Modells neu ermittelt, wenn die Schätzung der Startwerte aus Simulation 2 zu keiner akzeptablen Übereinstimmung zwischen simulierten und gemessenen Werten führt.

3.2.1 Ableitung von Standardanfangswerten

Für jeden Lauf des Modells SIMULAT-NC müssen Werte für die Anfangskonzentrationen der fünf organischen Modellkompartimente sowie für die zwei Kompartimente, die die mikrobielle Biomasse des Bodens repräsentieren (C_b und N_b), bereitgestellt werden. Soll das Modell für Freilandversuche eingesetzt werden, so ist davon auszugehen, dass nur für eine begrenzte Zahl dieser Modellvariablen gemessene Werte zur Verfügung stehen. Dasselbe gilt für die Laborexperimente, die in diesem Kapitel für den Test des Modells herangezogen werden. Mit Hilfe von Literaturdaten wird daher versucht, einen Satz an Startwerten abzuleiten, die als Standardwerte verwendet werden können, wenn keine gemessenen Werte verfügbar sind. Die Verwendbarkeit dieser Standardwerte wird mit Hilfe von Daten aus Laborexperimenten überprüft und stellt den jeweils ersten Schritt des Modelltestes dar (Simulation 1).

Die in den Inkubationsversuchen verwendeten Böden werden in den meisten Veröffentlichungen über den organischen C- und N-Gehalt des jeweiligen Bodens charakterisiert. Für die Ermittlung der Standardanfangswerte wird davon ausgegangen, dass sich aus der organischen Kohlenstoffkonzentration (C_{org}) die Konzentration an mikrobieller Biomasse (C_b) sowie eine Aufteilung in die einzelnen Modellkompartimente für den organischen Kohlenstoff ableiten lassen (vgl. Tabelle 16). So steigt die mikrobielle Biomassekonzentration (C_b) mit dem organischen C-Gehalt eines Bodens an. Eine umfangreiche Untersuchung zum Zusammenhang zwischen diesen beiden Größen wurde von ANDERSON & DOMSCH (1989) veröffentlicht, die mit Hilfe der Substrat-Induzierten-Respirations-Methode (SIR) den prozentualen Biomasse-C-Gehalt von 134 Agrarböden unterschiedlicher Bewirtschaftung in Mitteleuropa erfasst haben. Der Standardwert für den Startwert der C_b -Konzentration wird aus den Messungen von ANDERSON & DOMSCH (1989) abgeleitet, da dieser Datensatz eine Differenzierung nach der Bewirtschaftungspraxis eines Agrarbodens erlaubt und in SIMULAT-NC bereits für die Herleitung des „typischen“ Biomassegehaltes eines Bodens im Sterbeterm $\alpha(C_b)$ für die mikrobielle Biomasse verwendet wird (siehe Gleichung 26 in Kapitel 2.2.2). Ist die Bewirtschaftungspraxis eines Bodens nicht bekannt, wird in den folgenden Simulationen für den Biomasse-C-Anteil ein Startwert in Höhe von 2,5 % der organischen Bodensubstanz C_{org} angenommen. Nach ANDERSON & DOMSCH (1989) entspricht dieser Wert einer typischen

Biomasse-C-Konzentration bei Bewirtschaftung mit Fruchtwechsel und Stroh- oder Wirtschaftsdüngung.

Tabelle 16 Typische Werte sowie als „Standard“ verwendete Startwerte für die mikrobielle Biomasse und die organischen Kompartimente des Modells.

| Variable | Wert(e) | Quelle | Standardwert |
|--|---------------------------------------|--|--------------|
| C_b [% von C_{org}] | 2,4 - 4,0 2,2 | ANDERSON & DOMSCH (1989) VON GÖTZ (1997) | 2,5 |
| C_b/N_b [-] | 5,2 - 8,4 3,2 - 8,7 | JOERGENSEN et al. (1993) DENDOOVEN et al. (2000) | 6,0 |
| C_d [% von C_{org}] | 13 - 35 5 - 40 2 - 6 | NICOLARDOT & MOLINA (1994) STANFORD & SMITH (1972) Eigene Abschätzung | 3,0 |
| C_d/N_d [-] | 12 - 13 16,7 21 - 22 | NICOLARDOT et al. (1994) CORBEELS et al. (1999) HADAS & PORTNOY (1994) | 17 |
| C_s [% von C_{org}] | 0,05 - 0,25 0,2 - 0,5 0,4 - 1,1 | GREGORICH et al. (2000) SMITH et al. (1986) RÖVER & KAISER (1999) | 0,3 |
| C_h [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | | $C_h = C_{org} - C_d^{1)} - C_b - C_s^{1)}$ | - |
| N_h [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | | $N_h = N_{org} - N_d^{1)} - N_b$ | - |

¹⁾ Hintergrundkonzentration ohne Substratzufuhr;

Ein entscheidender Faktor dafür, ob in einem Boden eine Netto-Mineralisierung oder -Immobilisierung von mineralischem Stickstoff (N_{min}) stattfindet, ist in SIMULAT-NC das C/N-Verhältnis der mikrobiellen Biomasse. Für das C/N-Verhältnis von Mikroorganismen in Agrarböden variieren die Werte in der Literatur zwischen 3,2 und 8,7 (vgl. Tabelle 16). In SIMULAT-NC wird der Mittelwert von $C_b/N_b = 6,0$ als Standardanfangswert verwendet. Dieser Wert liegt in der gleichen Größenordnung wie sie von MUELLER et al. (1998) im Modell DAISY ($C_b/N_b = 6,7$) oder von CORBEELS et al. (1999) für das Modell NCSOIL ($C_b/N_b = 6,0$) als Startwerte angenommen werden.

Zwei weitere für die C- und N-Dynamik im Boden sehr wichtige Startwerte sind die Konzentration an labilem, d.h. mittelschnell abbaubarem organischen Kohlenstoff- und Stickstoff (C_d und N_d). Die Größe und Zusammensetzung dieses C- und N-Pools können unter Freilandbedingungen innerhalb eines Jahres sehr stark variieren: Ihm werden z.B. nach der Ernte große Mengen organischer Substanz in Form von Ernteresiduen zugeführt. Diese werden im Laufe eines Jahres, je nach mikrobieller Verwertbarkeit mit unterschiedlicher Geschwindigkeit abgebaut. Diese Variabilität der Konzentration über das Jahr macht eine Abschätzung der Anfangskonzentrationen für die Modellkompartimente C_d und N_d besonders unsicher und

schwierig. Dies trifft insbesondere auf die Simulation von Laborexperimenten zu, wenn nicht angegeben wird, zu welchem Zeitpunkt im Jahr die Bodenproben entnommen wurden sowie Angaben über die Bewirtschaftungspraxis fehlen. Die Unsicherheit bei der Abschätzung der Größe dieser Pools wird deutlich in der weiten Spanne von 5 bis 40 % der organischen Substanz, die STANFORD & SMITH (1972) für ihr Modell als Startwert für einen vergleichbaren organischen Pool annehmen. Bei NICOLARDOT & MOLINA (1994) liegen die berechneten Anteile von C_d an der organischen Substanz zwischen 13 und 35 %. Vorabschätzungen mit SIMULAT-NC, wie sie z.B. für die Modellkalibrierung in Kapitel 2.5.3 beschrieben sind, ergaben einen niedrigeren C_d -Anteil, der zwischen 2 und 6 % der organischen Substanz liegt. Dieser im Verhältnis zu den Literaturangaben niedrigere Wert ist dadurch begründet, dass diesem Kompartiment in SIMULAT-NC nur der polymere wasserunlösliche Anteil der Ernteresiduen zugeordnet wird, der unter mitteleuropäischen Klimabedingungen Umsatzzeiten in der Größenordnung von einem Jahr aufweist.

Eine Überschlagsrechnung soll das Zustandekommen der Größenordnung dieser Werte verdeutlichen. Nimmt man z.B. einen relativ hohen Strohertrag von 9000 kg Biomasse pro ha an, der zu einem Drittel (=Stoppeln) in die obersten 30 cm Boden eingearbeitet wird, so führt dies im Modell bei einem C-Gehalt von 45 % zu einer Zufuhr von $450 \text{ kg } C_d \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ Bodenschicht. Nimmt man zusätzlich an, dass über die im Boden verbleibende Wurzelbiomasse dem C_d -Pool weitere $225 \text{ kg } C \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ zugeführt werden (entsprechend einem Eintrag von 1500 kg Wurzeltrockenbiomasse in die oberen 30 cm des Bodens), so entspricht der frisch zugeführte C_d -Anteil bei einem Gesamtgehalt des Bodens an organischem Kohlenstoff (C_{org}) von 2 % noch 2,3 % von C_{org} . Würde die gesamte Strohmenge in den Boden eingearbeitet, ergäbe sich ein C_d -Anteil von 5,3 % von C_{org} . Hinzugerechnet werden müssen noch Ernteresiduen aus dem Vorjahr, die nicht verwertet wurden. So wird z.B. Getreidestroh im Laufe eines Jahres bis zu 70 % abgebaut (HAIDER & MARTIN, 1979). Bei diesen Werten kann es sich allerdings immer nur um Abschätzungen handeln, die durchaus nach oben und unten abweichen. Basierend auf diesen Abschätzungen wird als Startwert für C_d ein Wert von 3,0 % der organischen Substanz als Standardwert angenommen. Dieser Wert liefert die Hintergrundkonzentration an labilem organischen Kohlenstoff C_d , d.h. bei Experimenten mit Zugabe von Ernteresiduen wird dieser Wert jeweils der zugeführten Substratmenge hinzuaddiert.

Für das C/N-Verhältnis der labilen organischen Fraktion finden sich in der Literatur Werte von $C_d/N_d = 12 - 22$ (vgl. Tabelle 16). Die C/N-Werte liegen damit näher an den C/N-Verhältnissen der humosen Bodensubstanz als an denen von beispielsweise Getreidestroh. Als Standardwert für SIMULAT-NC wird der Mittelwert der oben angegebenen Spanne, d.h. $C_d/N_d = 17,0$ verwendet.

Beim Standardanfangswert für das Stoffkompartiment löslicher Kohlenstoff C_s wird davon ausgegangen, dass es sich um eine Konzentration handelt, die unter Laborbedingungen geringfügig höher liegt als die in Gleichung 25 (Kapitel 2.1) bei der mikrobiellen Verwertung des löslichen Kohlenstoffes eingeführte Grenzkonzentration $f_{C_s} (=0,002 \cdot C_h)$. Der Startwert

für die Hintergrundkonzentration an C_s wird mit 0,3 % der organischen Substanz C_{org} etwas höher angesetzt als f_{Cs} , da davon ausgegangen werden muss, dass bei Laborexperimenten durch die Veränderung der Bodenstruktur immer etwas zusätzliche organische Substanz freigesetzt wird, die mikrobiell direkt verwertbar ist.

Die Anfangskonzentration der stabilen organischen Substanz (C_h und N_h) wird durch Differenzbildung zwischen den Gesamtkonzentrationen an organischem C und N (C_{org} , N_{org}) und den bisher aufgezählten organischen C- und N-Anfangskonzentrationen des Modells ermittelt (siehe Tabelle 16).

Der Startwert für die denitrifikatorische mikrobielle Aktivität r_{den} wird auf null gesetzt, da die Laborexperimente unter aeroben Bedingungen durchgeführt wurden. Der Wert für die aerobe Aktivität r wird in Abhängigkeit von der Vorbehandlung des Bodens gewählt. Die mikrobielle Aktivität r erhält einen niedrigeren Startwert von 0,02, wenn eine Präinkubation des Bodens stattgefunden hat, d.h. wenn die bei Laborexperimenten anfänglich freigesetzte schnell verwertbare organische Substanz bereits abgebaut wurde und die durch das zusätzliche Substrat aktivierte mikrobielle Biomasse wieder in den Ruhezustand zurückgekehrt ist. Der Wert für r wird auf 0,07 gesetzt, d.h. es werden 7 % der Gesamtpopulation als aktiv angenommen, wenn keine Präinkubation stattgefunden hat und die mikrobielle Biomasse zu Beginn des Experimentes noch auf zusätzlichem C-Substrat wachsen kann.

Für die Startwerte der restlichen mineralischen C- und N-Kompartimente des Modells wird davon ausgegangen, dass entweder Messwerte vorliegen (NH_4^+ , NO_3^- , oder zusammen als mineralischer Stickstoff N_{min}), oder dass sie auf null gesetzt werden können (CO_2 , NO_2^- , N_2O , N_2).

3.2.2 Immobilisierung und Remineralisierung von N_{min} bei Strohzufuhr

Die Zufuhr von stickstoffarmer organischer Substanz wie z.B. Stroh nach der Getreideernte, führt durch die wachsende mikrobielle Biomasse in der Regel zunächst zu einer Netto-Immobilisierung des mineralischen Stickstoffes im Boden. Sobald der leichtverwertbare Anteil des Strohs abgebaut ist, kann jedoch die N-Mineralisierung durch das Absterben der mikrobiellen Biomasse überwiegen. Geschieht diese erneute Freisetzung von mineralischem Stickstoff im Herbst oder Winter, ohne dass ein Pflanzenbestand vorhanden wäre, kann es leicht zur Auswaschung von NO_3^- in das Grundwasser kommen. Um zu testen, wie gut SIMULAT-NC in der Lage ist, das Immobilisierungs- und Remineralisierungsverhalten bei einer kombinierten Stroh- und N_{min} -Gabe quantitativ abzuschätzen, wurde versucht die Ergebnisse eines Laborexperimentes von BJARNASON (1987) nachzuvollziehen. Dieses Experiment wurde von BJARNASON mit dem Ziel durchgeführt, Aussagen über den Einfluss der C-Quelle (Glukose oder Gerstenstroh) auf die Geschwindigkeit der Remineralisierung von frisch immobilisiertem N_{min} zu gewinnen. Da Glukose als Substrat in der Menge, wie sie im Experiment zugegeben wird, im Freiland nicht relevant ist, wird hier nur das Modellverhalten bei Strohzugabe ausgewertet. Für das Experiment wurde ein sandiger Lehm Boden bei 20°C

und einem Wassergehalt von umgerechnet 26 Vol. % für 63 Tage inkubiert. Der C-Gehalt des Bodens (C_{org}) betrug vor der Substratzugabe 2,5 %, der organische N-Gehalt (N_{org}) lag bei 0,2 %; das C/N-Verhältnis der organischen Substanz betrug somit 13,1. Der Boden wurde zu Versuchsbeginn (Tag 1) und noch einmal am Tag 21 mit umgerechnet je $150 \text{ kg N}_{min} \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ versetzt. Außerdem wurden dem Boden zu Versuchsbeginn $6480 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ in Form von Gerstenstroh als Kohlenstoffquelle zugeführt. Es liegen Messwerte für die NH_4^+ - und die NO_3^- -Konzentration vor, die für die Simulation zur N_{min} -Konzentrationen zusammengefasst wurden. Da Mikroorganismen bevorzugt NH_4^+ verwerten, wurde die Nitrifikation im Experiment durch Acetylen-Begasung unterbunden und konnte auch im Modell unberücksichtigt bleiben.

Simulation 1 – Standardwerte für Parameter- und Anfangswerte

Für den ersten Schritt des Modelltests (Simulation 1) werden die aus der Modellkalibrierung gewonnenen Parameter verwendet (siehe Kapitel 2.5), während die Startwerte für die nicht gemessenen Modellvariablen, wie in Kapitel 3.2.1 beschrieben, hergeleitet werden. Für die Simulation des Experimentes von BJARNASON (1987) mussten die Startwerte von insgesamt acht Zustandsvariablen des Modells bestimmt werden:

(1) Die mikrobielle Biomassekonzentration (C_b) sowie (2) ihr C/N-Verhältnis (d.h. N_b):

Für die Biomasse-C-Konzentration wurde der Standardwert von 2,5 % der organischen Bodensubstanz (C_{org}) eingesetzt, so dass der simulierte Boden zu Beginn der Simulation $934 \text{ kg C}_b \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ enthält. Ein mikrobielles C/N-Verhältnis von 6,0 führt dann zu einer N_b -Konzentration von $156 \text{ kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$. Die jeweiligen Gesamtkonzentrationen für C_b und N_b sowie alle anderen Anfangswerte sind in Tabelle 17 zusammengefasst.

(3) Die Anfangskonzentrationen für die labilen organischen Pools C_d und (4) N_d :

Die Anfangswerte für diesen Pool setzen sich zusammen aus der „Hintergrundkonzentration“ an C_d (C_d^*) und N_d (N_d^*), d.h. der Menge die bereits vor der Substratzugabe im Boden vorhanden ist, sowie dem polymeren wasserunlöslichen Material des zugegebenen Gerstenstrohs. Es wird davon ausgegangen, dass der Boden vor der Strohzugabe bereits eine C_d -Konzentration von 3 % der organischen Bodensubstanz ($=1121 \text{ kg C}_d^* \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$) aufweist. Ihr Anfangs-C/N-Verhältnis liegt daher mit einem Wert von 17 näher am C/N-Verhältnis der humosen organischen Substanz als an dem von frischem Getreidestroh, dessen C/N-Verhältnis laut NIESEL-LESSETHIN (1983) zwischen 50 und 100 liegt. Das C/N-Verhältnis des Gerstenstrohs wird auf 80 gesetzt, so dass dem Boden umgerechnet $66 \text{ kg N}_d \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ zugeführt werden. Von der Gesamtkohlenstoffmenge des Stroh fließen 85 % ($=5508 \text{ kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$) in den C_d -Pool. Das C/N-Verhältnis des mittleren organischen Gesamtpools (C_d/N_d) erhöht sich durch die Strohzufuhr auf 49.

(5) Die Anfangskonzentration an löslichem Kohlenstoff C_s :

Die C_s -Konzentration im Boden setzt sich ebenfalls zusammen aus einer C_s -Hintergrundkonzentration (C_s^*) und dem löslichen Kohlenstoffgehalt im Gerstenstroh. Es

wird angenommen, dass das applizierte Stroh 15 % ($= 972 \text{ kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$) löslichen Kohlenstoff C_s enthält (SCHOMBERG et al., 1994) und dass die Hintergrundkonzentration des Bodens an C_s bei 0,3 % von C_{org} liegt, so dass die Gesamtkonzentration zu Versuchsbeginn $1084 \text{ kg C}_s \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ beträgt.

(6) Die Anfangskonzentration an C_h und (7) N_h :

Die Anfangskonzentration für den stabilen organischen Kohlenstoff C_h wird nach $C_h = C_{org} - C_d^* - C_b - C_s^*$ berechnet, wobei für den labilen Pool C_d und den wasserlöslichen Pool C_s nur die Hintergrundkonzentrationen C_d^* und C_s^* eingesetzt werden. Der N-Anteil N_h wird entsprechend nach $N_h = N_{org} - N_d^* - N_b$ berechnet. Das C_h/N_h -Verhältnis der stabilen organischen Fraktion beträgt danach 13,4.

(8) Der Anfangswert für die mikrobielle Aktivität r : Da der Boden vor Versuchsbeginn nicht präinkubiert wurde und daher davon auszugehen ist, dass durch die Vorbehandlung des Bodens schnell verfügbares Substrat freigesetzt worden ist, wird der Startwert für die mikrobielle Aktivität auf einen Wert von $r = 0,07$ gesetzt.

Simulationsergebnisse

Der von BJARNASON (1987) gemessene Konzentrationsverlauf für N_{min} weist zu Beginn des Experimentes eine kräftige N-Immobilisierung von umgerechnet $93 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ in 21 Tagen auf, der nach der zweiten N_{min} -Gabe eine Netto-N-Mineralisierung von $14 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ innerhalb der letzten 40 Tage des Experimentes folgt. Dieser Verlauf wird vom Modell prinzipiell auch mit Standardwerten nachvollzogen. Allerdings ist die anfängliche Immobilisierung in der Simulation sehr viel schwächer ausgeprägt, als es die Daten nahe legen (siehe Abbildung 18a). Da kein N-Entzug durch Pflanzen stattfindet, wird das Ausmaß der N-Immobilisierung in diesem Experiment ausschließlich durch die mikrobielle Biomasse bestimmt. Die N-Aufnahmerate der Mikroorganismenpopulation hängt im Modell von fünf Faktoren ab (siehe Gleichung 30 in Kapitel 2.1): (1) der Konzentration an mikrobieller Biomasse (C_b), (2) der NH_4^+ -Konzentration, (3) der mikrobiellen Aktivität r , (4) dem Gradienten zwischen aktuellem und minimalem C/N-Verhältnis der Mikroorganismenpopulation und (5) dem Wert der maximalen mikrobiellen NH_4^+ -Aufnahmerate $\mu NH4_{max}$.

Tabelle 17 Anfangs- und Parameterwerte sowie Modelleffizienz für die Simulation von N-Immobilisierung und N-Remineralisierung nach Daten von BJARNASON (1987).

| | Anfangswerte | | |
|--|--|---|---|
| Variable [Einheit] | Simulation 1 (Standardwerte) | Simulation 2* (neue Anfangswerte) | Simulation 3* (neue Parameterwerte) |
| C_b [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 934 | | |
| N_b [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 156 | 107 | |
| C_d [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 6629 | | |
| N_d [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 135 | | |
| C_h [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 35183 | | |
| N_h [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 2628 | 2677 | |
| C_s [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 1084 | | |
| N_{min} [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 106 | | |
| r [-] | 0,07 | | |
| | | | |
| Parameter [Einheit] | Parameterwerte | | |
| $\mu_{NH4_{max}}$ [Tag ⁻¹] | 1,1 | | 2,3 |
| | | | |
| Variable | Modelleffizienz | | |
| N_{min} | -0,025 | 0,649 | 0,985 |

* Ist in einer Spalte kein Wert angegeben ist, so entsprechen die Werte jeweils dem nächsten linksstehenden Wert in derselben Zeile.

Da der C_s -Pool in der Simulation bereits nach vier Tagen um 90 % abgebaut ist, fällt die mikrobielle Aktivität r , nach einem kurzen Anstieg auf 0,16, innerhalb von zehn Tagen auf ein niedriges Niveau von 0,04 zurück (siehe Abbildung 18b und c). Die N-Immobilisierung innerhalb der ersten acht Tage ist damit hauptsächlich auf den Wachstumsschub der mikrobiellen Biomasse C_b zurückzuführen, der mit dieser kurzen Phase erhöhter Aktivität einhergeht. So wächst die Konzentration an Biomasse-C bis zum dritten Versuchstag auf 124 % der Ausgangskonzentration an, um danach bis zum Ende des Experimentes wieder auf den Ausgangswert zurückzufallen. Diese beiden Faktoren, d.h. das Absterben der mikrobiellen Biomasse und der Rückgang der mikrobiellen Aktivität führen dazu, dass die Netto-N-Immobilisierung ab dem siebten Tag zum Stillstand kommt. Die geringe Ausprägung der N-Immobilisierung ist zu einem großen Teil auf das anfangs relativ enge C/N-Verhältnis der Mikroorganismen zurückzuführen, was dazu führt, dass der Gradient zwischen aktuellem und minimalem C/N-Verhältnis sehr klein ist. Wie Abbildung 18d zeigt, ist der anfängliche Wachstumsschub dementsprechend auch mit einer Aufweitung des mikrobiellen C/N-Verhältnisses von 6,0 auf 7,0 verbunden. Allerdings führt das Vorhandensein von schnell verwertbarem organischen Substrat und ausreichend mineralischem Stickstoff (N_{min}) eher zu verstärktem Wachstum des Bakterienanteils der Mikroorganismenpopulation im Boden, die ein engeres C/N-Verhältnis aufweisen als Bodenpilze (MOORE et al., 2000). Daher sollte

sich auch das C/N -Verhältnis der Gesamtpopulation eher verengen als erweitern. Um diesen Kurvenverlauf zu korrigieren werden im nächsten Schritt die Anfangswerte für das mikrobielle C/N -Verhältnis variiert (siehe Simulation 2).

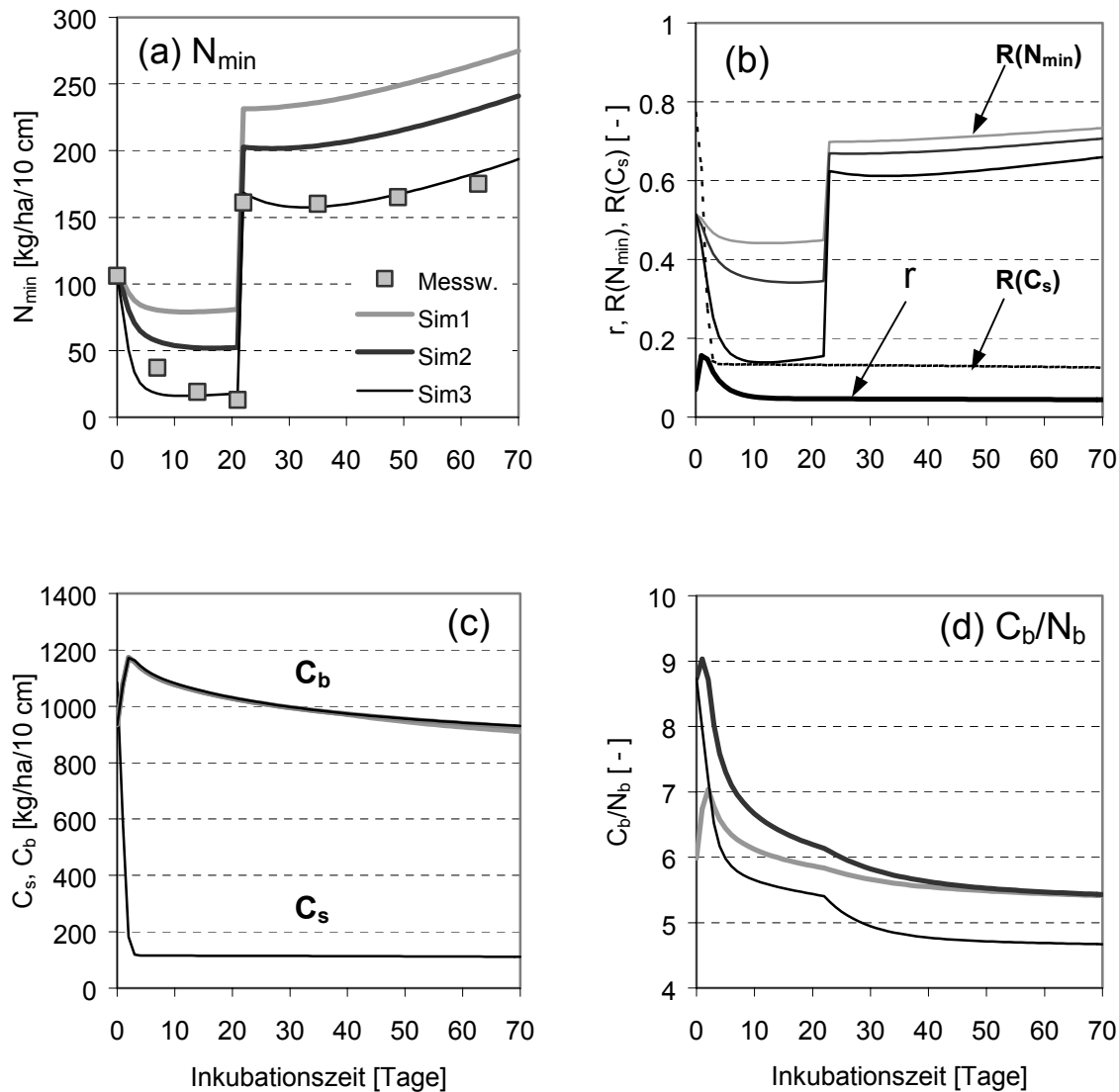


Abbildung 18 (a) Gemessener und simulierter Konzentrationsverlauf für N_{\min} (Sim1: ME=-0,025; Sim2: ME=0,649; Sim3: ME=0,985). (Daten von BJARNASON, 1987), (b) zeitlicher Verlauf der mikrobiellen Aktivität r sowie ihrer Steuerfunktionen für das Kohlenstoff- und das Stickstoffsubstrat, (c) Konzentrationsverlauf für die mikrobielle Biomasse C_b und den löslichen organischen Kohlenstoff C_s und (d) Veränderung des mikrobiellen C/N -Verhältnisses. Die hellgraue Kurve zeigt jeweils Simulation 1 mit Standardwerten, die dunkelgraue Kurve Simulation 2 mit variierten Startwerten und die schwarze Kurve Simulation 3 mit neu angepassten Parameterwerten.

Simulation 2 – Anpassung der Anfangswerte

Da der generelle Datenverlauf vom Modell gut nachvollzogen wird, kann das Ergebnis der Simulation verbessert werden, indem lediglich die anfängliche Immobilisierung verstärkt wird. Dies kann bei Veränderung der Anfangswerte auf zwei Arten geschehen: Zum Einen

durch einen höheren Startwert für das mikrobielle C/N -Verhältnis, so dass der Gradient zwischen maximalem N/C -Verhältnis und aktuellem N/C -Verhältnis ($NC_{bmax}-NC_b$) erhöht wird. Als Folge davon wird durch Multiplikation des Gradienten mit den maximalen Immobilisierungsraten $\mu NH4_{max}$ und $\mu NO3_{max}$ die mikrobielle N-Aufnahme beschleunigt (siehe Gleichung 30 in Kapitel 2.1). Die zweite Möglichkeit besteht darin, die mikrobielle Aktivität r durch eine höhere Anfangskonzentration an organischem Substrat (C_s und C_d) länger auf einem hohen Niveau zu halten, so dass das mikrobielle Wachstum und damit auch die verstärkte N-Aufnahme länger anhält.

Im ersten Schritt wurde das Anfangs- C/N -Verhältnis der mikrobiellen Biomasse in den Grenzen zwischen $C_b/N_b = 3,2 - 8,7$ (DENDOOVEN et al., 2000) neu geschätzt. Die beste Modelleffizienz von 0,649 ergab sich bei dem weitesten C/N -Verhältnis von 8,7. Der Startwert für die N_b -Konzentration wurde daher bei gleichbleibender C_b -Konzentration auf $107 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ abgesenkt (vgl. Tabelle 17, Spalte 2). Da eine Erhöhung der Anfangskonzentrationen für das lösliche organische C-Substrat C_s sowie den labilen organischen Kohlenstoff C_d kein befriedigendes Ergebnis erzielte, sondern lediglich die Remineralisierung von N_{min} in der zweiten Phase des Experimentes verhindert wurde, blieben die Anfangswerte für die C_d - und C_s -Konzentration unverändert.

Simulationsergebnisse

Wie die dunkelgraue Kurve in Abbildung 18a zeigt, verdoppelt sich die immobilisierte N-Menge durch die Aufweitung des Startwertes für das mikrobielle C/N -Verhältnis. Allerdings entspricht der Verlauf der simulierten N_{min} -Konzentration noch immer nicht dem Datenverlauf. Auch das C/N -Verhältnis der mikrobiellen Biomasse steigt zu Versuchsbeginn weiter an, wenn auch weniger ausgeprägt als bei der Simulation mit Standardwerten. Im letzten Simulationsschritt wird daher untersucht, inwieweit Parameterveränderungen zu einer besseren Übereinstimmung zwischen Daten und Simulation führen.

Simulation 3 – Variation der Parameter

Eine weitere Möglichkeit in SIMULAT-NC die N_{min} -Immobilisierung zu verstärken, besteht darin, die maximalen Immobilisierungsraten für NH_4^+ ($\mu NH4_{max}$) und NO_3^- ($\mu NO3_{max}$) zu erhöhen. Von einer Veränderung der maximalen Immobilisierungsrate für NO_3^- wird hier allerdings abgesehen, da Mikroorganismen bevorzugt NH_4^+ aufnehmen und eine Neuschätzung von $\mu NO3_{max}$ Auswirkungen auf die Parametrisierung des Denitrifikationsmodells hätte, in dem NO_3^- eine weitaus wichtigere Rolle spielt als beim Mineralisierungs- und Immobilisierungsgeschehen unter aeroben Bedingungen.

Simulationsergebnisse

Wie in Abbildung 18a zu sehen ist, führt eine Erhöhung der Immobilisierungsrate $\mu NH4_{max}$ von 1,1 auf $2,3 \text{ Tag}^{-1}$ zu sehr guter Übereinstimmung zwischen Daten und Simulation (ME = 0,985). Von einer Veränderung weiterer Parameter konnte daher abgesehen werden. Auch das

mikrobielle C/N-Verhältnis zeigt eine durchgehende Verengung, solange ausreichend mineralischer Stickstoff vorhanden ist (siehe Abbildung 18d).

Wie die Ergebnisse dieser Validierungsläufe zeigen, ist SIMULAT-NC in der Lage den generellen Verlauf von Immobilisierung und Remineralisierung von mineralischem Stickstoff bei Strohzugabe nachzuvollziehen. Allerdings reagiert der Verlauf der N_{\min} -Konzentration sehr sensitiv auf den Startwert für das C/N-Verhältnis der mikrobiellen Biomasse, womit deutlich wird, dass das Arbeiten mit Standardwerten hier mit großen Unsicherheiten behaftet ist.

3.2.3 Modellverhalten bei Applikation von Weizenresiduen

SIMULAT-NC wurde für den Einsatz unter Witterungsbedingungen und Anbaumethoden entwickelt, wie sie im Südosten Niedersachsens üblich sind. Weit verbreitet ist in dieser Region der Anbau von Winterweizen, für dessen Simulation das Gesamtmodell SIMULAT im nächsten Kapitel dieser Arbeit eingesetzt wird. Da die Einarbeitung von Ernteresiduen in den Boden zur gängigen Bewirtschaftungspraxis gehört, ist es von besonderem Interesse das Modellverhalten für die Verwendung von Rückständen des Weizenanbaus zu prüfen. Mit den Inkubationsversuchen von CORBEELS et al. (1999) liegen Daten sowohl für die Einarbeitung von Weizenstroh als auch von Weizenstopplern und -wurzeln vor, die für einen Modelltest gut geeignet sind, da sowohl die CO_2 -Entwicklung als auch der Konzentrationsverlauf von mineralischem Stickstoff gemessen wurde.

Von CORBEELS et al. (1999) wurden Proben aus den oberen 20 cm eines landwirtschaftlich genutzten lehmigen Bodens mit verschiedenen Ernterückständen versetzt und über 224 Tage inkubiert. Die Experimente wurden bei einer Temperatur von 22°C und einem Wassergehalt von 75 % der Feldkapazität, d.h. unter aeroben Bedingungen, durchgeführt. Der Boden enthielt 1,11 % organischen Kohlenstoff (C_{org}) und 0,11 % organischen Stickstoff (N_{org}). Als Messwerte stehen für alle Simulationen Zeitreihen für die kumulierten CO_2 -Emissionen und die N_{\min} -Konzentration zur Verfügung. Außerdem liefern die Autoren Informationen über die Zusammensetzung der organischen Substanz, die eine Zuordnung der C- und N-Mengen zu den einzelnen Modellkompartimenten von SIMULAT-NC erleichtern. Für die Modellvalidierung werden die Daten folgender drei Experimente von CORBEELS et al. (1999) genutzt:

Experiment 1: Keine Substratzugabe (Kontrollexperiment);

Experiment 2: Zugabe von Weizenstroh als organisches Substrat;

Experiment 3: Zugabe von Weizenstopplern und Wurzelbiomasse der obersten 20 cm Boden als organisches Substrat.

Bei keinem dieser Experimente wurde zusätzlich mineralischer Stickstoff zugeführt. Die jeweiligen Substrate wurden in getrockneter und gemahlener Form mit dem Boden gemischt.

Für jedes der drei Experimente wurden alle drei Schritte des Modelltests durchgeführt (Simulation 1-3). Da für alle Experimente der gleiche Boden verwendet wurde, wurden im Experi-

ment 1 (ohne Substratzugabe) mit Hilfe des Modells alle Hintergrundkonzentrationen für die organische Substanz und die mikrobielle Biomasse ermittelt und in der Simulation der Experimente 2 und 3 (mit Substratzugabe) nicht mehr verändert. Die Anfangskonzentration an mikrobieller Biomasse (C_b und N_b) sowie die Hintergrundkonzentrationen für die lösliche organische Substanz C_s^* , die labile organische Substanz (C_d^* und N_d^*) und die Konzentration für die stabile organische Substanz (C_h und N_h) sind daher für alle drei Experimente gleich groß und werden - einmal für Experiment 1 geschätzt - in den folgenden Experimenten mit Zufuhr organischer Substanz nicht mehr variiert.

3.2.3.1 Experiment 1 (Kontrollexperiment ohne Substratzugabe)

Für dieses Experiment wurde der Boden ohne Zugabe eines organischen Substrates für 224 Tage inkubiert.

Simulation 1 – Standardwerte für Parameter- und Anfangswerte

Die erste Simulation dieses Datensatzes von CORBEELS et al (1999) wird mit den aus der Kalibrierung stammenden Parameterwerten sowie Standardwerten für die Anfangswerte der Modellvariablen durchgeführt. Da von CORBEELS et al. (1999) lediglich Angaben zur Gesamtkonzentration an organischer Substanz (C_{org} , N_{org}) und an mineralischem Stickstoff (N_{min}) gemacht wurden, mussten Annahmen für die Anfangswerte der sechs Zustandsvariablen C_b , N_b , C_s , C_d , N_d und die mikrobielle Aktivität r getroffen werden. Die Anfangswerte werden anhand der in Tabelle 16 aufgeführten Angaben aus der Konzentration an organischem C (C_{org}) hergeleitet.

Die Anfangskonzentration für den Kohlenstoff der mikrobiellen Biomasse C_b wird auf 2,5 % der organischen Substanz des Bodens, also $416 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ gesetzt (siehe Tabelle 18). Das C/N-Verhältnis der mikrobiellen Biomasse bekommt den Wert 6,0. Die Hintergrundkonzentration an labilem organischen C (C_d^*) beträgt 3 % der organischen Substanz, das C_d/N_d -Verhältnis wird auf 17 gesetzt. Die Anfangskonzentration an C_s beträgt $50 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ und damit 0,3 % von C_{org} . Da für die Experimente eine Präinkubation durchgeführt wurde, bekommt der Anfangswert für die mikrobielle Aktivität r den Wert 0,02. Die für Simulation 1 festgelegten Anfangswerte sind noch einmal in Tabelle 18 zusammengefasst.

Tabelle 18 Anfangs- und Parameterwerte sowie Modelleffizienz für die Simulation der N_{\min} - und CO_2 -Konzentration in einem Boden ohne Substratzufuhr (Simulation 1-3 für Experiment 1 nach Daten von CORBEELS et al. (1999)).

| | Anfangswerte | | |
|---|--|---|--|
| Variable | Simulation 1 (Standardwerte) | Simulation 2* (neue Anfangswerte) | Simulation 3** (neue Parameterwerte) |
| C_b [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 416 | | |
| N_b [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 69 | 48 | |
| C_d [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 500 | 947 | |
| N_d [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 29 | 70 | |
| C_h [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 15684 | 15287 | |
| N_h [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 1552 | 1532 | |
| C_s [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 50 | | |
| N_{\min} [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 44 | | |
| r [-] | 0,02 | | |
| | | | |
| Parameter | Parameterwerte | | |
| Keine Neuschätzung | | | |
| | | | |
| Variable | Modelleffizienz | | |
| N_{\min} | 0,824 | 0,975 | |
| CO_2 | 0,630 | 0,982 | |

* Ist in einer Spalte kein Wert angegeben ist, so entsprechen die Werte jeweils dem nächsten linksstehenden Wert in derselben Zeile. ** Für dieses Experiment wurde keine dritte Simulation durchgeführt, da die Übereinstimmung zwischen Simulation und Messwerten durch eine Parameterneuschätzung nicht verbessert werden konnte.

Simulationsergebnisse

Die Daten von CORBEELS et al. (1999) zeigen für die N_{\min} -Konzentration bis zum Tag 10 eine leichte N-Immobilisierung von 4 kg ha⁻¹ 10 cm⁻¹, der bis zum Ende der Inkubationsperiode eine kräftige Mineralisierung von Stickstoff folgt, die die N_{\min} -Konzentration von 44 auf 97 kg N ha⁻¹ 10 cm⁻¹ ansteigen lässt. Das Modell überschätzt den anfänglichen Datenverlauf ganz leicht und unterschätzt die N-Mineralisierung am Ende des Versuches um 20 %, d.h. 21 kg ha⁻¹ 10 cm⁻¹ (siehe Abbildung 19a). Die Modelleffizienz ME beträgt für N_{\min} trotz dieser Abweichung noch 0,824 (Tabelle 18), was für eine Simulation ohne Anpassung von Anfangswerten oder Parametern durchaus zufriedenstellend erscheint, aber die Abweichung in der grundsätzlichen Dynamik verschleiert.

Für die kumulierten CO_2 -Emissionen zeigen die Messwerte am Ende der Inkubationszeit einen Wert von 1252 CO_2 -C ha⁻¹ (siehe Abbildung 19b). Dieser Wert wird vom Modell um 48 % unterschätzt; die Modelleffizienz ME beträgt für CO_2 folglich nur 0,630. Da der anfängliche Kurvenverlauf, d.h. der Zeitabschnitt, in dem der lösliche Kohlenstoff mineralisiert wird,

vom Modell gut nachvollzogen wird, werden im folgenden Schritt (Simulation 2) vor allem die Anfangskonzentrationen für den labilen organischen Pool (C_d und N_d) verändert. Da aber auch die N_{min} -Dynamik verbesserungswürdig erscheint, wird - aus den Erkenntnissen des „BJARNSAON“-Experimentes folgernd (s.o.) - auch der Anfangswert für das mikrobielle C/N-Verhältnis neu geschätzt.

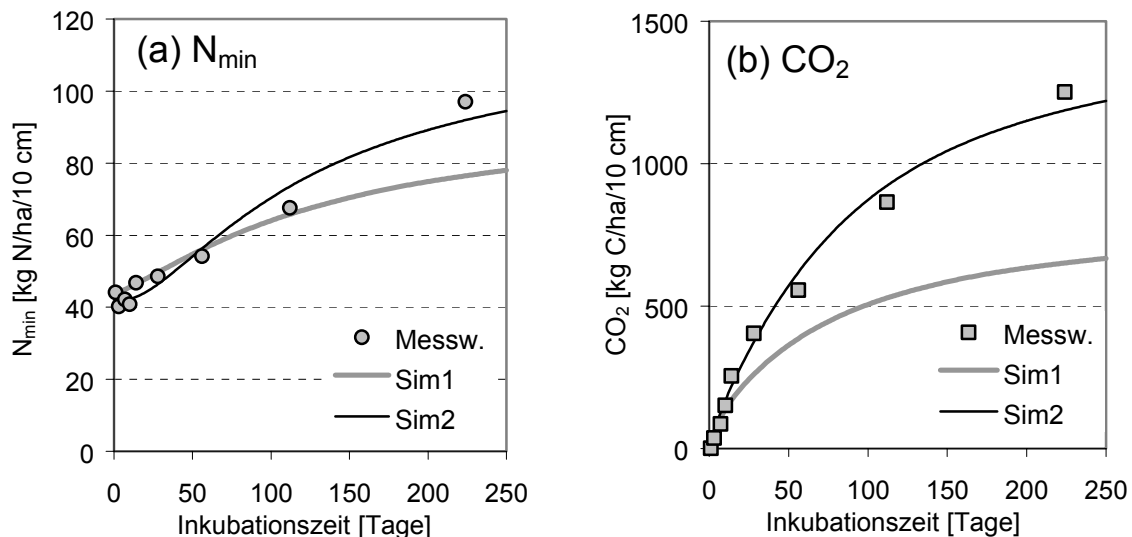


Abbildung 19 Ergebnisse der Simulation eines Experimentes ohne Substratzugabe nach Daten von CORBEELS et al. (1999): (a) Verlauf der gemessenen und simulierten N_{min} -Konzentration (Sim1: ME=0,824; Sim2: ME=0,975), (b) Verlauf der gemessenen und simulierten kumulierten CO_2 -Emissionen (Sim1: ME=0,630; Sim2: ME=0,982).

Simulation 2 – Anpassung der Anfangswerte

Die Neuschätzung der Anfangskonzentrationen ergibt eine Erhöhung der N_d -Konzentration von 29 auf 70 kg ha⁻¹ 10 cm⁻¹, eine Erweiterung des C/N-Verhältnisses der mikrobiellen Biomasse von 6,0 auf 8,7 sowie eine annähernde Verdopplung der C_d -Hintergrundkonzentration von 550 auf 946 kg C ha⁻¹ 10 cm⁻¹. Diese neue Anfangskonzentration für den labilen organischen Kohlenstoff C_d^* entspricht einem Anteil von 5,7 % des organischen Bodenkohlenstoffes. Der Wert liegt damit niedriger als der von NICOLARDOT et al. (1994) für einen vergleichbaren organischen Pool im Modell NCSSOIL ermittelte Wert von 30 % der organischen Substanz, aber durchaus noch im Bereich des von STANFORD & SMITH (1972) errechneten Wertes von 5 bis 40 % der organischen Bodensubstanz. Der Startwert für das C_d/N_d -Verhältnis sinkt von 17 auf 13,5 und liegt damit näher an dem von NICOLARDOT et al. (1994) für diesen organischen Pool berechneten C/N-Verhältnis von 12-13.

Simulationsergebnisse

Eine Optimierung der Anfangswerte für den N-Anteil der mikrobiellen Biomasse und die Konzentration der labilen organischen Fraktionen (C_d und N_d) führt zu einer entscheidenden Verbesserung der Simulationsergebnisse (siehe Abbildung 19a und b). So steigt die Modelleffizienz ME für CO_2 auf 0,982 und die Modelleffizienz für NH_4^+ auf den Wert 0,975. Die zusätzliche Aufweitung des mikrobiellen C/N-Verhältnisses von 6,0 auf 8,7 erlaubt auch das

Nachvollziehen der leichten N-Immobilisierung zu Beginn des Experimentes (siehe Abbildung 19a).

Die für Experiment 1 (ohne Substratzugabe) ermittelten Anfangswerte für C_d , N_d und C_s dienen als Hintergrundkonzentrationen für die organischen Stoffkompartimente in den folgenden Simulationen der Experimente mit Substratzugabe. Auch die Konzentration an Biomasse-C und -N wird aus dieser Simulation übernommen.

Simulation 3 – Variation von Parametern

Abschließend wurde getestet, ob sich die Übereinstimmung zwischen Simulation und Daten durch eine Veränderung der Modellparameter weiter verbessern lässt. Da dies nicht der Fall war, bleiben die Parameterwerte unverändert, d.h. wie in der Modellkalibrierung geschätzt.

3.2.3.2 Experiment 2 (Zugabe von Weizenstroh)

In Experiment 2 wurden dem Boden umgerechnet $7830 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ organische Substanz in Form von getrocknetem und gemahlenem Weizenstroh zugegeben. Das Weizenstroh wies einen C-Gehalt von 43,2 %, sowie ein C/N-Verhältnis von 67 auf. Vom Gesamt-Kohlenstoff der applizierten organischen Substanz lagen umgerechnet $621 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ in löslicher Form sowie $2761 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ in Form polymerer Verbindungen wie Hemicellulosen und Lignine vor (CORBEELS et al., 1999).

Simulation 1 - Standardwerte für Parameter- und Anfangswerte

Um in der abschließenden Auswertung einen möglichst großen, wenn auch nicht gänzlich unabhängigen, Datensatz für eine vergleichende Modellbewertung zu erhalten, werden für Simulation 1 des zweiten Experimentes noch einmal Standardwerte für Anfangs- und Parameterwerte eingesetzt. Diese entsprechen der typischen Informationsmenge, die bei einem Modelleinsatz unter Freilandbedingungen verfügbar wäre, so dass abgeschätzt werden kann, wie gut das Modell - ohne zusätzliche Nachkalibrierung - gemessene Werte nachvollziehen kann.

Für die mikrobielle Biomasse (C_b und N_b) sowie für die Hintergrundkonzentrationen an mittelschwer abbaubarem organischen C und N (C_d^* und N_d^*) und löslichem C (C_s^*) werden die über Tabelle 16 berechneten Standardwerte verwendet. Das heißt, der Anteil der mikrobiellen Biomasse an der organischen Substanz des Bodens beträgt 2,5 % ($416 \text{ kg C}_b \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$); das mikrobielle C/N-Verhältnis liegt bei 6,0. Die Hintergrundkonzentration an labilem organischen C (C_d^*) beträgt 3,0 % des organischen Bodenkohlenstoffes (C_{org}) ($500 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$) und das C/N-Verhältnis wird auf 17,0 gesetzt. Der Hintergrundgehalt an löslichem Kohlenstoff (C_s^*) beträgt 0,3 % des organischen Bodenkohlenstoffes C_{org} bzw. $50 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$. Zu den Hintergrundkonzentrationen der organischen Pools C_d , N_d und C_s werden außerdem die Stoffmengen in C- bzw. N-Einheiten hinzuaddiert, die dem Boden zusätzlich über das Weizenstroh zugeführt werden: Der lösliche C-Anteil des Strohs ($621 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$) wird der Hintergrundkonzentration des Bodens an C_s hinzuaddiert während die polymeren C-

Verbindungen ($2761 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$) der Hintergrundkonzentration an C_d hinzuaddiert werden. Der polymere organische Stickstoff aus dem Weizenstroh ($20 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$) wird dem Kompartiment N_d zugeordnet. Die Anfangswerte für Simulation 1 sind noch einmal in Tabelle 19 zusammengefasst.

Tabelle 19 Anfangs- und Parameterwerte sowie Modelleffizienz für die Simulation der N_{\min} - und der CO_2 -Konzentration in einem Boden mit Zufuhr von Weizenstroh. (Simulation 1-3 für Experiment 2 nach Daten von CORBEELS et al., 1999).

| | Anfangswerte | | |
|---|--|---|---|
| Variable [Einheit] | Simulation 1 (Standardwerte) | Simulation 2* (neue Anfangswerte) | Simulation 3* (neue Parameterwerte) |
| $C_b [\text{kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}]$ | 416 | | |
| $N_b [\text{kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}]$ | 69 | 48 | |
| $C_d [\text{kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}]$ | 3261 | 3708 | |
| $N_d [\text{kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}]$ | 49 | 90 | |
| $C_h [\text{kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}]$ | 15534 | 15287 | |
| $N_h [\text{kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}]$ | 1552 | 1532 | |
| $C_s [\text{kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}]$ | 671 | | |
| $N_{\min} [\text{kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}]$ | 45 | | |
| $r [-]$ | 0,02 | | |
| | | | |
| Parameter [Einheit] | Parameterwerte | | |
| $\mu NH_{4\max} [\text{Tag}^{-1}]$ | 1,1 | | 4,5 |
| $mn_{Cs} [\text{kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}]$ | 0,18 | | 0,58 |
| | | | |
| Variable | Modelleffizienz | | |
| N_{\min} | -1,692 | -2,066 | 0,424 (0,990) |
| CO_2 | 0,585 | 0,446 | 0,917 |

* Ist in einer Zelle kein Wert angegeben ist, so entsprechen die Werte jeweils dem nächsten linksstehenden Wert in derselben Zeile.

Simulationsergebnisse

Wie an den gemessenen N_{\min} -Konzentrationen in Abbildung 20a zu sehen ist, führt eine Zugabe von Weizenstroh zu einer starken Netto-Immobilisierung von mineralischem Stickstoff. Diese führt innerhalb von 56 Tagen zu einem Rückgang der N_{\min} -Konzentration von umgerechnet 45 auf $3 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$. Die N_{\min} -Konzentration bleibt für weitere 56 Tage auf einem relativ niedrigen Niveau, um dann bis zum Ende des Versuchszeitraumes wieder auf 107 % des Anfangsniveaus ($48 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$) anzusteigen.

Der simulierte Verlauf der N_{\min} -Konzentration (siehe Abbildung 20a, hellgraue Kurve) folgt in Simulation 1 mit einer anfänglichen Netto-Immobilisierung und der nachfolgenden Mineralisierung in der Tendenz dem Verlauf der gemessenen Werte. Allerdings fällt die simulierte

N-Immobilisierung weit geringer aus, als dies im Experiment der Fall ist ($16 \text{ kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ im Vergleich zu $42 \text{ kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$). Außerdem steigt die N_{\min} -Konzentration in Simulation 1 auf 269 % der Ausgangskonzentration und überschätzt damit den Messwert um das 2,5-fache (121 anstatt $48 \text{ kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$). Der Verlauf der N_{\min} -Konzentration ist im Modell einerseits eine Konsequenz der Höhe des N_{\min} -Durchsatzes der Mikroorganismen als Senke und andererseits eine Folge der N-Mineralisierung aus der organischen Substanz (im Modell N_d und N_h) als N_{\min} -Quelle. Außerdem wird über die absterbende mikrobielle Biomasse sowohl NH_4^+ als auch N_d nachgeliefert, was ebenfalls, wenn auch zeitverzögert, zu einem Anstieg der N_{\min} -Konzentration führt.

Der mikrobielle N_{\min} -Durchsatz, d.h. die über den gesamten Versuchszeitraum von den Mikroorganismen immobilisierte N-Menge, beträgt umgerechnet $223 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$. Die Rate der N_{\min} -Aufnahme ist aufgrund der sich verändernden mikrobiellen Aktivität r sehr variabel: Sie erreicht zu Beginn der Simulation ein Maximum von $6,3 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$, um dann ab Tag 84 auf einen Wert von $< 1,0 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$ zu sinken. Der Gesamtfluss aus den organischen Pools N_d und N_h und der abgestorbenen mikrobiellen Biomasse N_b in den N_{\min} -Pool summiert sich über den gleichen Zeitraum zu $291 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ auf. Es werden also in der Simulation insgesamt zusätzlich 68 kg N_{\min} ($= 291 \text{ kg N ha}^{-1}$ mineralisiertes N – 223 kg N ha^{-1} immobilisiertes N) in die Bodenlösung abgegeben. Im Experiment dagegen steigt die N_{\min} -Konzentration nur von 45 auf $48 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$, d.h. es erfolgt eine Netto-Mineralisierung von nur $3 \text{ kg N}_{\min} \text{ ha}^{-1}$. Die Höhe der N-Mineralisierung aus der organischen Bodensubstanz ergibt sich sowohl über die mikrobielle Aktivität r als auch über die Mineralisierungskonstanten für die organische Substanz. Diese Ergebnisse sind Hinweise darauf, dass entweder r oder die jeweiligen Konstanten in dieser Simulation überschätzt werden.

Ein weiterer Hinweis in diese Richtung ist die Tatsache, dass das Modell auch die Entwicklung der CO_2 -Emissionen für diese Simulation überschätzt: Während für das Experiment über den Inkubationszeitraum kumulierte CO_2 -Emissionen von $2749 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ gemessen wurden, werden bei der Simulation Gesamtemissionen von $3981 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ erreicht, d.h. der Messwert wird um 31 % überschätzt (siehe Abbildung 20b, hellgraue Kurve). Da aber die gemessenen und simulierten Werte bis zum Tag 28, d.h. bei fünf von acht Messwerten gut übereinstimmen, weist die Modelleffizienz ME für CO_2 noch einen akzeptablen Wert von 0,585 auf (siehe Tabelle 19). Die Überschätzung der CO_2 -Emissionen gegen Ende des Versuchszeitraumes sowie die überschätzte Stickstoffmineralisierung könnte ein Hinweis darauf sein, dass die Mineralisierungsraten für die organische Substanz für diesen Boden zu hoch sind. Dieser Punkt wird in der dritten Simulation des Experimentes noch einmal aufgegriffen.

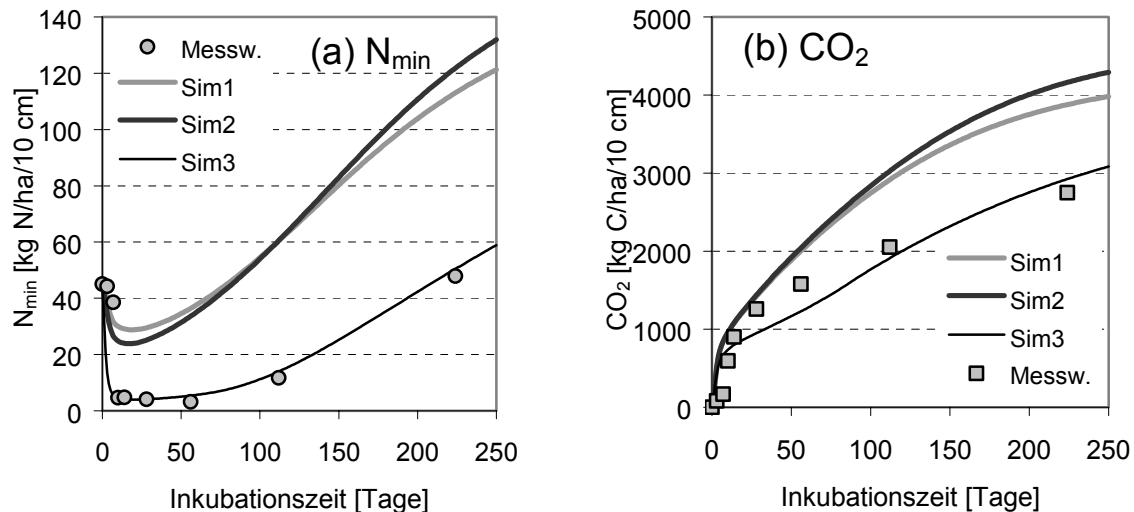


Abbildung 20 Ergebnisse der Simulation eines Experimentes mit Zugabe von Weizenstroh (a) Verlauf der gemessenen und simulierten N_{\min} -Konzentration, (Sim1: ME=-1,692; Sim2: ME=-2,066; Sim3: ME=0,424 (0,990)) (b) Verlauf der gemessenen und simulierten kumulierten CO_2 -Emissionen (Sim1: ME=0,585; Sim2: ME=0,446; Sim3: ME=0,917); Daten von CORBEELS et al. (1999).

Simulation 2 - Anpassung der Anfangswerte

Für die zweite Simulation des Experimentes mit Zugabe von Weizenstroh werden die Anfangswerte der Zustandsvariablen im Vergleich zu Simulation 1 verändert, die Parameterwerte bleiben unverändert. Die Anfangswerte werden allerdings nicht neu geschätzt, sondern es werden die Werte verwendet, die bereits für das Kontrollexperiment ermittelt wurden: Für die Konzentration an mikrobieller Biomasse (C_b , N_b) sowie die Hintergrundkonzentrationen für den labilen organischen Pool (C_d^* , N_d^*) und den löslichen organischen Kohlenstoff (C_s^*), werden die Werte aus Tabelle 18 (Spalte 2) verwendet. Anschließend werden die Kohlenstoff- und Stickstoffmengen, die mit dem Weizenstroh verabreicht werden, den jeweiligen Modellkompartimenten (C_d , N_d , C_s) zugeordnet. Der Unterschied zu Simulation 1 besteht also darin, dass (1) das mikrobielle C/N-Verhältnis von 6,0 auf 8,7 erhöht wird, (2) die Hintergrundkonzentration an labilem organischen C (C_d^*) um $447 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ oder 14 % erhöht wird und (3) die N_d^* -Konzentration um $41 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ oder 84 % erhöht wird. Durch diese Veränderungen nehmen die Anfangskonzentrationen für den humosen C- und N-Pool (C_h , N_h) um 1,6 % bzw. 1,3 % ab.

Simulationsergebnisse

Wie in Abbildung 20a (dunkelgraue Kurve) zu sehen ist, bringen die veränderten Anfangswerte für den Verlauf der N_{\min} -Konzentration nur eine minimale Verbesserung bei der anfänglichen Immobilisierung. Die Endkonzentration an N_{\min} wird dagegen sogar stärker überschätzt als in der Simulation mit Standardwerten, da sich bei einer erhöhten N_d -Anfangskonzentration auch der Gesamt-N-Durchsatz der mikrobiellen Biomasse von $223 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ auf $248 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1} 224 \text{ Tage}^{-1}$ erhöht. Für die CO_2 -Entwicklung hat sich das Ergebnis ebenfalls leicht verschlechtert (siehe Abbildung 20b, dunkelgraue Kurve), da,

im Vergleich zu Simulation 1, 447 kg mehr labiler organischer Kohlenstoff C_d zur Verfügung steht. Für dieses Experiment muss also im folgenden Schritt noch eine Anpassung von Modellparametern erfolgen, um zufriedenstellende Simulationsergebnisse zu erzielen.

Simulation 3 – Variation von Parametern

Basierend auf dem Modell mit den Anfangswerten aus Simulation 2, wurden für Simulation 3 zusätzlich Parameterwerte neu geschätzt, um eine Verbesserung der Simulationsergebnisse für die CO_2 -Bildung und den Verlauf der N_{min} -Konzentration zu erhalten.

Da die Simulation der N_{min} -Konzentration bis hierher eine starke Überschätzung im Vergleich zum Verlauf der Daten zeigt, wurde im ersten Schritt die maximale Immobilisierungsrate für NH_4^+ ($\mu NH4_{max}$) neu geschätzt. Die Optimierung ergab bei einer Erhöhung des Wertes von $\mu NH4_{max}$ von 1,1 auf 4,5 Tag^{-1} die beste Übereinstimmung zwischen simulierten und gemessenen N_{min} -Werten; insbesondere das 100-tägige Verharren der N_{min} -Konzentration auf niedrigem Niveau wird vom Modell ausgesprochen gut nachvollzogen (siehe Abbildung 20a, schwarze Kurve). Diese N_{min} -Dynamik in der ersten Hälfte der Simulation ist darauf zurückzuführen, dass bei einer N_{min} -Konzentration von nur 4 $kg\ N\ ha^{-1}\ 10\ cm^{-1}$ nicht die C_s -Verfügbarkeit, sondern die Stickstoffversorgung zum limitierenden Faktor für die mikrobielle Aktivität r wird.

Wie Abbildung 21 zeigt, führt die Erhöhung der maximalen Immobilisierungsrate $\mu NH4_{max}$ dazu, dass die Steuerfunktion $R(N_{min})$ innerhalb der ersten 15 Tage schneller abfällt als die entsprechende Steuerfunktion für das lösliche organische C-Substrat $R(C_s)$. Da trotz der ebenfalls schnell sinkenden mikrobiellen Aktivität r weiterhin eine, wenn auch geringe, Netto-N-Mineralisierung stattfindet, steigt die N_{min} -Konzentration langsam wieder an, so dass auch die mikrobielle Aktivität wieder zu steigen beginnt. Der Anstieg von r beschleunigt wiederum die Abbaugeschwindigkeit der organischen Substanz (hier vor allem N_d), und führt zu einem weiteren, sich immer mehr beschleunigenden Anstieg der N_{min} -Konzentration. Diese positive Rückkopplung zwischen der mikrobiellen Aktivität r und der N_{min} -Konzentration wirkt sich solange steigernd auf die mikrobielle Aktivität aus, bis die Verfügbarkeit an löslichem Kohlenstoff C_s zum limitierenden Faktor wird (Tag 83). Ab diesem Tag beginnt r zwar wieder leicht bis auf den Anfangswert von 0,02 zu sinken, allerdings so langsam, dass die N-Mineralisierungsraten relativ hoch bleiben und damit auch die N_{min} -Konzentration weiterhin ansteigt. Ob die hier für das Modell beschriebenen Prozesse auch in der Realität wirksam werden, muss allerdings offen bleiben, da die mikrobielle Aktivität unter Substratmangelbedingungen, wie sie für das Modell beschrieben wird, einer direkten Messung bislang nicht zugänglich ist.

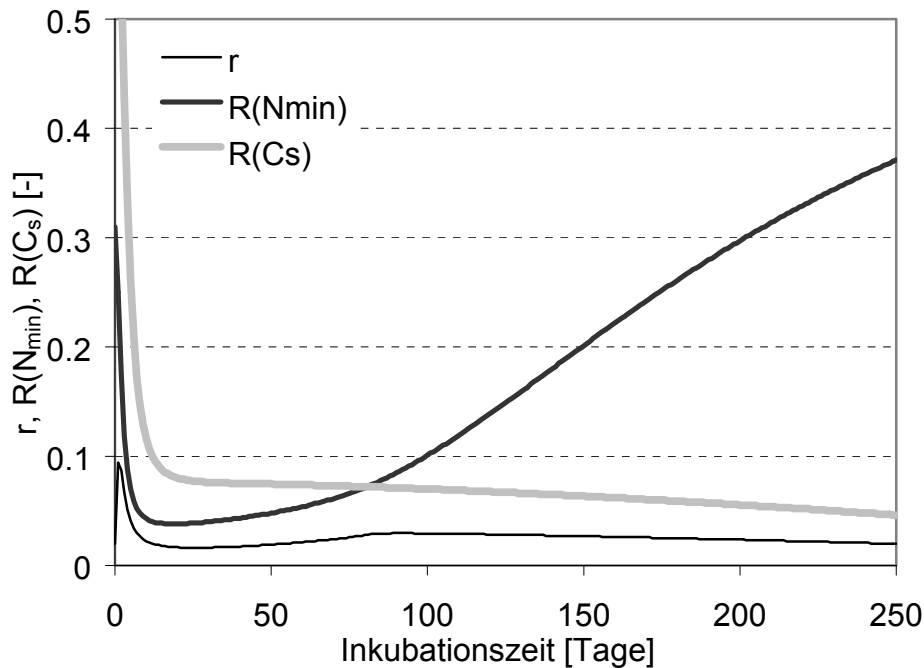


Abbildung 21 Verlauf der mikrobiellen Aktivität r und der Steuerfunktionen der mikrobiellen Aktivität $R(C_s)$ und $R(N_{min})$ für Simulation 3.

Die CO_2 -Emissionen werden in Simulation 1 und 2 um 31 % bzw. 51 % überschätzt. Die Erhöhung der Immobilisierungsrate $\mu\text{NH}_{4_{max}}$ führt zu einer verbesserten Simulation der CO_2 -Emissionen, auch wenn der Endwert noch um 18 % überschätzt wird (nicht dargestellt). Um die simulierten CO_2 -Emissionen weiter zu vermindern, wäre es nun naheliegend, die maximalen Abbauraten ηCd_{max} und ηCh_{max} für die organischen Pools C_d bzw. C_h neu zu schätzen. Allerdings führt die Herabsetzung dieser beiden Abbauraten zu einer mangelnden Nachlieferung an C_s aus den organischen C-Pools. Dies verursacht einen schnelleren Rückgang der C_s -Konzentration und hält die mikrobielle Aktivität r auf einem niedrigeren Niveau, als dies für die Variation von $\mu\text{NH}_{4_{max}}$ allein der Fall ist. Dies hat wiederum zur Folge, dass sich auch die Mineralisierungsrate für N_{min} stark verringert und das N_{min} -Niveau am Ende der Simulation stark unterschätzt wird. Da eine Verbesserung der Simulation der CO_2 -Emissionen hier also nur auf Kosten einer Verschlechterung der N_{min} -Simulation möglich wäre, wurde auf eine Veränderung der maximalen Abbauraten ηCd_{max} und ηCh_{max} verzichtet.

Eine weitere Größe, die einen Einfluss auf die Rate der CO_2 -Emissionen hat, ist der mikrobielle Bedarf an Erhaltungsenergie (mn_{C_s}). Wird der Wert für mn_{C_s} von 0,18 auf 0,58 Tag^{-1} erhöht, verbessert sich die Simulation der CO_2 -Emissionen soweit, dass die Überschätzung am Ende der Inkubationsperiode nur noch 6 % beträgt. Ein möglicher Erklärungsansatz für den höheren mikrobiellen Erhaltungsbedarf wäre, dass bei N-Limitierung andere Mechanismen, wie z.B. die Freisetzung von zellintern gespeichertem Stickstoff, einen höheren Energiebedarf für die Erhaltung der Zellfunktionen (ohne Wachstum) verursachen, als dies bei C-

Limitierung der Fall ist, für die der Erhaltungsbedarf ermittelt wurde (siehe SMITH et al., 1986).

Mit dem Konzept der mikrobiellen Aktivität und der nur leicht geänderten Parametrisierung lässt sich die N_{min} -Dynamik so gut nachbilden, dass sich die Modelleffizienz für N_{min} von negativen Werten in Simulation 1 und 2 auf 0,424 erhöht (vgl. Tabelle 19); werden bei der Berechnung der Modelleffizienz die Datenpunkte für die anfängliche Lag-Phase nicht mit in die Auswertung einbezogen, verbessert sich das Ergebnis sogar auf $ME = 0,990$. Auch die Modelleffizienz für CO_2 verbessert sich von 0,446 auf 0,917.

3.2.3.3 Experiment 3 (Zugabe von Weizenstopplern und Wurzelbiomasse)

Im dritten Experiment von CORBEELS et al. (1999) wurden dem Boden $7830 \text{ kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ Weizenstopplern sowie Wurzelbiomasse der obersten 20 cm des Bodens in gemahlener und getrockneter Form zugeführt und der Boden anschließend für 224 Tage inkubiert. Der Boden erhält mit der organischen Substanz $3046 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ polymeren Kohlenstoff sowie $376 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ in Form wasserlöslicher C-Bestandteile. Der Unterschied zu Experiment 2 mit Zufuhr von Weizenstroh besteht darin, dass (1) die Zufuhr von löslichem Kohlenstoff im Vergleich zu Experiment 2 nahezu halbiert wurde sowie (2) 10 % mehr wasserunlöslicher polymerer Kohlenstoff zugeführt werden. Der C_s -Anteil an der Gesamt-Substratmenge liegt damit bei 11 % im Vergleich zu 18 % in Experiment 2. Die Gesamtmenge an organischem C sowie N, die bei beiden Experimenten zugeführt wurde, ist vergleichbar groß.

Mit Hilfe dieses dritten Datensatzes bzw. Experimentes kann ein weiterer Modelltest mit der Fragestellung durchgeführt werden, ob und wie das Modell auf die abweichende Substratzusammensetzung von Experiment 3 bei ansonsten gleichen Bedingungen reagiert. Der Modelltest für Experiment 3 wird analog zu dem für Experiment 2 in drei Schritten durchgeführt.

Simulation 1 - Standardwerte für Parameter- und Anfangswerte

Der Modelltest für das Experiment mit Zugabe von Weizenstopplern wird mit einer Simulation begonnen, bei der Standardwerte für Anfangs- und Parameterwerte Verwendung finden. Die Anfangskonzentrationen für die mikrobielle Biomasse (C_b und N_b) sind identisch mit denen von Simulation 1 von Experiment 2, nämlich $416 \text{ kg C}_b \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ und $69 \text{ kg N}_b \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$, entsprechend 2,5 % von C_{org} für C_b und mit einem C_b/N_b -Verhältnis von 6,0 für die mikrobielle Biomasse (vgl. Tabelle 20). Die Hintergrundkonzentrationen an löslichem Kohlenstoff C_s^* , mittelschwer abbaubarem Kohlenstoff C_d^* sowie Stickstoff N_d^* haben die gleiche Größe wie in Simulation 1 von Experiment 2, da das Experiment mit dem gleichen Boden durchgeführt wird. Die polymeren C- und N-Bestandteile der zugegebenen Weizenstopplern und -wurzeln werden dem C_d - bzw. N_d -Pool zugerechnet sowie der lösliche C-Anteil des Substrates dem C_s -Pool. Die hieraus resultierenden Konzentrationen für C_d , N_d und C_s sind in Tabelle 20 zu finden. Die löslichen N-Anteile des Substrates sind im ersten Messwert für den mineralischen Stickstoff N_{min} berücksichtigt. Der Anfangswert für die mikrobielle Aktivität r wird

aufgrund der Präinkubation auf 0,02 festgelegt. Die Parameterwerte entsprechen den Werten aus der Modellkalibrierung.

Tabelle 20 Anfangs- und Parameterwerte sowie Modelleffizienz für die Simulation der N_{min} - und der CO_2 -Konzentration in einem Boden mit Zufuhr von Weizenstoppeln und Wurzeln; Daten von CORBEELS et al. (1999).

| | Anfangswerte | | |
|--|--|---|---|
| Variable | Simulation 1 (Standardwerte) | Simulation 2* (neue Anfangswerte) | Simulation 3* (neue Parameterwerte) |
| C_b [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 416 | | |
| N_b [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 69 | 48 | |
| C_d [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 3546 | 3992 | |
| N_d [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 51 | 92 | |
| C_h [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 15534 | 15287 | |
| N_h [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 1552 | 1532 | |
| C_s [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 426 | | |
| N_{min} [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 45 | | |
| r [-] | 0,02 | | |
| | | | |
| Parameter | Parameterwerte | | |
| $\mu NH4_{max}$ [1/Tag] | 1,1 | | 4,0 |
| | | | |
| Variable | Modelleffizienz | | |
| N_{min} | -0,470 | -0,241 | 0,663 (0,959) |
| CO_2 | 0,704 | 0,650 | 0,911 |

* Ist in einer Zelle kein Wert angegeben ist, so entsprechen die Werte jeweils dem nächsten linksstehenden Wert in derselben Zeile.

Simulationsergebnisse

Der Verlauf der gemessenen Konzentrationen für den mineralischen Stickstoff N_{min} ähnelt dem N_{min} -Verlauf beim Experiment mit Strohzugabe: Nach einer kurzen Lag-Phase folgt eine schnelle N-Immobilisierung, die die N_{min} -Konzentration bis zum 28. Tag auf unter 2 kg N ha⁻¹ 10 cm⁻¹ absinken lässt. Die nachfolgende N-Mineralisierung setzt nur langsam ein, lässt dann aber die N_{min} -Konzentration auf 160 % der Ausgangskonzentration ansteigen, im Vergleich zu 107 % der Ausgangskonzentration in Experiment 2 (siehe Abbildung 22a). Die N_{min} -Konzentration in Experiment 3 ist damit gegen Ende der Inkubationszeit, bei gleicher Ausgangskonzentration, um 24 kg N ha⁻¹ 10 cm⁻¹ höher als in Experiment 2 (Weizenstroh). Diese höhere N-Mineralisierung lässt sich aus den von CORBEELS et al. (1999) gegebenen Informationen nur schwer begründen, da die N-Zufuhr über die Weizenstoppeln nur 3 kg N ha⁻¹ 10 cm⁻¹ und damit vernachlässigbar höher liegt als in Experiment 2.

Die Simulation der N_{\min} -Konzentration zeigt für Experiment 3 eine leicht schwächere Immobilisierung als die Simulation für Experiment 2. Die Rate der mikrobiellen N-Aufnahme erreicht in Experiment 3 aufgrund des geringeren Anteils an löslichem Kohlenstoff im Substrat einen Maximalwert von $5,3 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$, im Vergleich zu $6,3 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$ bei Experiment 2. Im Großen und Ganzen zeigt die Simulation von Experiment 3 mit Standardwerten sehr ähnliche Abweichungen vom Datenverlauf wie Simulation 1 für Experiment 2. Die Modelleffizienz ME für N_{\min} liegt auch hier aufgrund der Verschiebung zu höheren Konzentrationen im negativen Bereich bei $-0,470$.

Die gemessenen kumulierten CO_2 -Emissionen betragen über den gesamten Versuchszeitraum $2892 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ (siehe Abbildung 22b). Dieser Wert ist geringfügig höher als in Experiment 2. Im Unterschied zu den Messergebnissen für Experiment 2 verlaufen die CO_2 -Emissionen in Experiment 3 am Anfang jedoch langsamer. Während in Experiment 2 am Tag 28 bereits $1257 \text{ kg CO}_2 \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ emittiert wurden, betrug der Wert für Experiment 3 erst $971 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$, also 77 % des in Experiment 2 beobachteten Wertes. Dieser Unterschied könnte auf den geringeren Anteil an löslichem Kohlenstoffsubstrat in Experiment 3 zurückzuführen sein. Gegen Ende der Inkubationsperiode unterscheiden sich die in Experiment 2 und 3 emittierten CO_2 -Mengen allerdings nur noch um 5 %.

Simulation 1 für die kumulierten CO_2 -Emissionen stimmt bis zum Tag 28 gut mit den Messwerten überein (siehe Abbildung 22b, hellgraue Kurve). Auch die, im Vergleich zu Experiment 2, am Anfang geringeren Emissionen werden vom Modell gut abgebildet. So werden für den Zeitraum bis zum Tag 28 in Experiment 3 nur 82 % der CO_2 -Menge von Experiment 2 emittiert. Nach Tag 28 werden die CO_2 -Emissionen vom Modell jedoch stark überschätzt; trotzdem beträgt die Modelleffizienz ME für CO_2 noch $0,704$ (vgl. Tabelle 20).

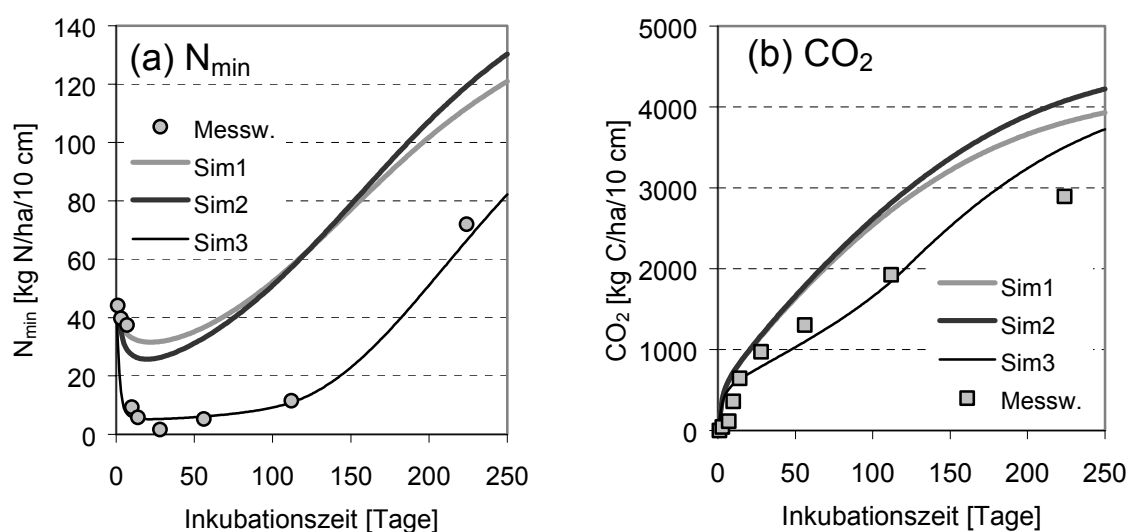


Abbildung 22 Verlauf der gemessenen und simulierten (a) N_{\min} -Konzentration (Sim1: $ME=-0,470$; Sim2: $ME=-0,241$; Sim3: $ME=0,663$ ($0,959$)) und (b) kumulierten CO_2 -Emissionen bei Zufuhr von Weizenstoppeln- und -wurzeln (Sim1: $ME=0,704$; Sim2: $ME=0,650$; Sim3: $ME=0,911$); Daten von CORBEELS et al. (1999).

Simulation 2 - Anpassung der Anfangswerte

Eine Anpassung der Anfangswerte erfolgt hier, indem die Konzentrationen für die mikrobielle Biomasse (C_b und N_b) sowie die Hintergrundkonzentrationen für den labilen organischen Pool (C_d^* und N_d^*) und den löslichen Kohlenstoff C_s^* aus dem Kontrollexperiment (Experiment 1) übernommen werden. Das mikrobielle C/N-Verhältnis wird also von 6,0 auf 8,7 angehoben, indem die in der mikrobiellen Biomasse fixierte N-Menge abgesenkt wird. Die C_d - und N_d -Hintergrundkonzentration wird leicht angehoben, während die C_s -Hintergrundkonzentration unverändert bleibt. Basierend auf diesen Werten wurde außerdem die stabile organische Bodenfraktion C_h und N_h neu berechnet. Zu den Hintergrundkonzentrationen von C_d , N_d und C_s wurden abschließend die jeweiligen Substratmengen hinzuaddiert und so die neuen Anfangskonzentrationen berechnet, die in Spalte 2 von Tabelle 20 noch einmal zusammengefasst sind.

Simulationsergebnisse

Die Ergebnisse der Modellrechnung zeigen weder für die Simulation der mineralischen Stickstoffkonzentration N_{min} noch für die kumulierten CO_2 -Emissionen eine wesentliche Verbesserung der Ergebnisse (siehe Abbildung 22a und b, dunkelgraue Kurven). Die Modelleffizienz ME für N_{min} bleibt im negativen Bereich und für CO_2 verschlechtert sie sich sogar. Die Ursache hierfür liegt darin, dass die Anfangswerte nur unwesentlich verändert wurden. Zwar steigt die N_d -Konzentration um 80 % im Verhältnis zu Simulation 1, da aber dieser Pool nur die mittelfristige N-Dynamik beeinflusst, wird die schnelle N-Immobilisierung zu Beginn des Experimentes von dieser Größe wenig beeinflusst. Um die Simulation dieses Prozesses zu verbessern ist offensichtlich eine Korrektur der Parameter erforderlich.

Simulation 3 – Variation von Parametern

In der letzten Simulation für diesen Datensatz wird, wie schon in Experiment 2, die maximale Immobilisierungsrate für NH_4^+ ($\mu NH4_{max}$) neu geschätzt. Eine Erhöhung der maximalen Immobilisierungsrate $\mu NH4_{max}$ von 1,1 auf $4,0 \text{ Tag}^{-1}$ verbessert die Übereinstimmung zwischen der gemessenen und der simulierten N_{min} -Konzentration entscheidend (siehe Abbildung 22a, schwarze Kurve). Die Modelleffizienz ME für N_{min} steigt auf 0,611 bzw. auf 0,959, wenn die Datenpunkte für die Lag-Phase zu Beginn des Experimentes aus der Berechnung von ME herausgenommen werden. Der neu geschätzte Parameter $\mu NH4_{max}$ unterscheidet sich damit in seinem Wert nur wenig von dem Wert für Experiment 2 ($\mu NH4_{max} = 4,5 \text{ Tag}^{-1}$).

Für die simulierten CO_2 -Emissionen lässt die optische Auswertung noch einige Abweichungen von der gemessenen Kurve erkennen, wenn nur die maximale Immobilisierungsrate $\mu NH4_{max}$ erhöht wird (siehe Abbildung 22b, schwarze Kurve); trotzdem steigt die Modelleffizienz ME für die kumulierten CO_2 Emissionen von 0,650 auf einen sehr guten Wert von 0,911. Da eine Erhöhung des Erhaltungsumsatzes mn_{Cs} , wie in Experiment 2, zwar die Simulationsergebnisse für CO_2 verbessert, gleichzeitig aber die für N_{min} verschlechtert und auch eine Änderung der Abbauraten für die organische Substanz keine Verbesserung der Simulationsergebnisse bringt, wird auf eine weitere Anpassung der Parameterwerte verzichtet.

Auch bei diesem Experiment liegen die Gründe für die gute N_{\min} -Simulation in der Limitierung der mikrobiellen Aktivität r durch die niedrige N_{\min} -Konzentration im Boden. Die, im Vergleich zu Experiment 2, höhere N-Mineralisierung bis auf 160 % der N_{\min} -Ausgangskonzentration am Ende der Inkubationsperiode wird vom Modell ebenfalls sehr gut nachvollzogen. Als zusätzliche N_{\min} -Quelle fungiert hier, neben dem zugegebenen Substrat, ein verstärkter Abbau der stabilen organischen Bodensubstanz N_h . Dies überrascht auf den ersten Blick, da in diesem Experiment weniger mikrobiell direkt verwertbares C-Substrat (C_s) zugeführt wird, was eigentlich zu einer niedrigeren mikrobiellen Aktivität r und damit einem langsameren Abbau der organischen Substanz führen sollte. Wie Abbildung 23 zeigt, ist die Freisetzungsrates für N_{\min} aus dem stabilen organischen Pool N_h für Experiment 3 aber fast durchgängig höher als für Experiment 2 mit höherer C_s -Zufuhr.

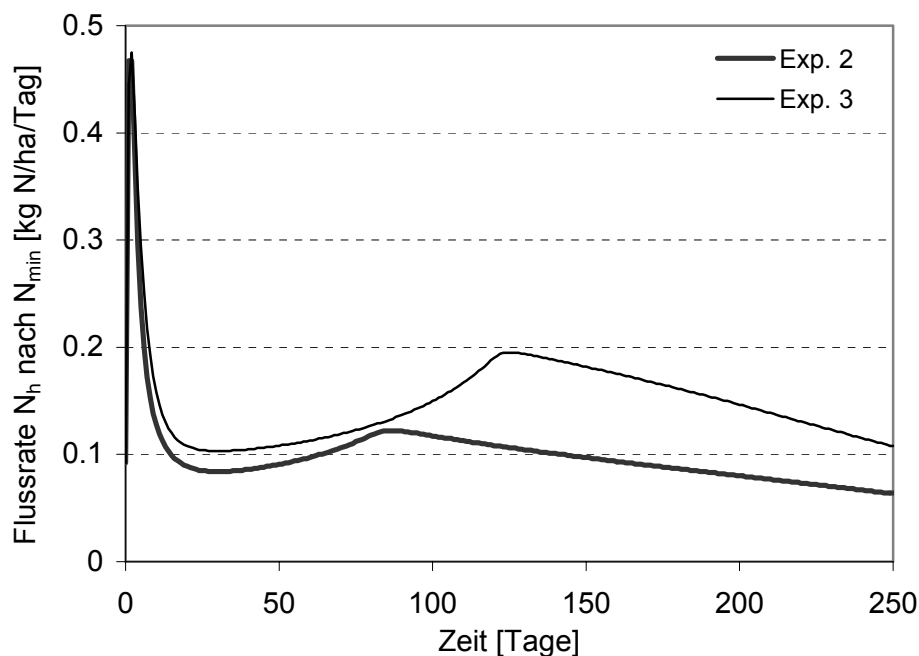


Abbildung 23 Simulierte Rate der N_{\min} -Bildung aus der stabilen organischen N-Fraktion N_h bei einer Applikation von Weizenstroh (Exp. 2) sowie Stoppeln und Wurzelbiomasse (Exp. 3).

Es wird deutlich, dass die Höhe der Flussrate prinzipiell dem Trend der r -Funktion folgt, wie sie in Abbildung 21 für das Experiment 2 mit Weizenstrohgabe bereits dargestellt ist. Der Verlauf der r -Funktion wird bei diesem Experiment durch den Wechsel von N- zu C-Limitierung geprägt, der für Experiment 3 erst zu einem späteren Zeitpunkt und auf einem höheren Niveau der r -Funktion stattfindet. Da in Experiment 3 im Vergleich zum Experiment 2 der Erhaltungsumsatz der mikrobiellen Biomasse mn_{C_s} um den Faktor 3,1 niedriger ist und die mikrobielle Biomasse aufgrund der geringeren C_s -Anfangskonzentration zu Beginn weniger stark wächst, bleibt die C_s -Konzentration höher (und damit auch die Steuerfunktion $R(C_s)$). Als Konsequenz geschieht der Wechsel von C- zu N-Limitierung in Experiment 3 später und auf einem höheren Niveau der mikrobiellen Aktivität r , da es länger dauert, bis die Steuerfunktion $R(N_{\min})$ den Wert von $R(C_s)$ übersteigt und damit als limitierender Faktor aus-

scheidet. Die N_{\min} -Konzentration kann also nur durch diesen Zeitpunkt des Wechsels so stark ansteigen, wie es die Daten von CORBEELS et al. (1999) nahe legen.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass insbesondere die Simulation des N_{\min} -Verlaufes einer für Freilandverhältnisse typischen Situation durch Verwendung des Minimumprinzips innerhalb der r -Funktion sowie die Parametrisierung der Steuerfunktionen sehr erfolgreich ist. Andere Modelle können zwar die anfängliche N-Immobilisierung nachbilden, oft wird aber das Ausmaß der nachfolgenden N-Mineralisierung stark unterschätzt (siehe z.B. CORBEELS et al., 1999).

3.2.4 Modellverhalten bei Applikation von Weizenstroh

Als Abschluss der Modellvalidierung wird ein Datensatz aus einem Laborexperiment von HARDEN (1998) herangezogen, der vom Untersuchungsstandort Neuenkirchen des SFB 179 stammt. Für diesen Standort wird das Simulationsmodell im abschließenden Freilandtest eingesetzt, so dass Anfangswerte für Modellvariablen, wie z.B. die mikrobielle C- und N-Konzentration abgeleitet werden können, die aus den Freilandexperimenten nicht standardmäßig zur Verfügung stehen. Die Bodenproben für das Experiment wurden nach der Weizen-ernte aus den obersten 30 cm des Bodens (A_p -Horizont) entnommen. Der organische C-Gehalt des Bodens betrug 1,0 %. Der Gesamt-N-Gehalt des Bodens lag bei 0,12 %, oder $1800 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$, was abzüglich des N_{\min} -Gehaltes von $60 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ noch eine Konzentration an organischem N von $1740 \text{ kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ ergab. Das Ziel des Experimentes von HARDEN (1998) bestand darin, die Auswirkungen einer Strohzugabe auf die mikrobiellen C- und N-Umsätze zu untersuchen. Zu diesem Zweck wurde ein präinkubierter Boden mit Stroh versetzt und anschließend bei 12°C und einem Wassergehalt von 20 Gew. % für 235 Tage inkubiert (Experiment 2). Außerdem wurde ein Kontrollexperiment ohne Substratzufuhr auf die gleiche Weise durchgeführt (hier Experiment 1). Zu Beginn des Experimentes und anschließend zu vier weiteren Zeitpunkten wurden die Konzentrationen an mineralischem Stickstoff (N_{\min}), mikrobiellem Kohlenstoff (C_b) und mikrobiellem Stickstoff (N_b) sowie die kumulierten CO_2 -Emissionen gemessen.

Die Simulation dieser Experimente erfolgt auf die gleiche Art, wie sie bereits auf die Datensätze von BJARNASON (1987) und CORBEELS et al. (1999) angewendet wurde. Es werden insgesamt drei Simulationen für jedes der beiden Experimente durchgeführt. Das Kontrollexperiment ohne Substratzugabe (Experiment 1) dient wiederum für die Bestimmung der Hintergrundkonzentrationen für den labilen organischen Pool C_d^* und N_d^* , sowie den wasserlöslichen Pool C_s^* .

3.2.4.1 Experiment 1 (Kontrollexperiment ohne Substratzugabe)

Für Experiment 1 wurde der Boden ohne Zugabe von C- oder N-Substrat für 235 Tage inkubiert.

Simulation 1 - Standardwerte für Parameter- und Anfangswerte

Für diese Simulation werden für alle Anfangskonzentrationen, mit Ausnahme des mineralischen Stickstoffes N_{min} , Standardwerte eingesetzt. Die Messwerte für die Konzentration an mikrobiellem Kohlenstoff C_b und Stickstoff N_b bleiben unberücksichtigt. Sie werden auf $375 \text{ kg } C_b \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ ($= 2,5 \%$ der organischen C-Konzentration des Bodens) bzw. $63 \text{ kg } N_b \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ (entsprechend $C_b/N_b = 6,0$) gesetzt (vgl. Tabelle 21). Der Anteil der labilen organischen Fraktion C_d am Gesamtkohlenstoffgehalt des Bodens C_{org} beträgt 3% ($450 \text{ kg } C_d \text{ ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$) mit einem C/N-Verhältnis von $17,0$, was zu einer N_d -Anfangskonzentration von $27 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ führt. Der C_s -Anteil beläuft sich mit einer Konzentration von $45 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ auf $0,3 \%$ von C_{org} . Die verbleibende Differenz zwischen dem Gesamtkohlenstoffgehalt des Bodens und der Konzentration an C_b , C_d und C_s wird dem stabilen organischen Pool C_h zugeordnet. Genauso wird der N_h -Pool aus der Differenz zwischen der Gesamtkonzentration an organischem N (N_{org}) und den zwei Pools N_b und N_d berechnet. Die mikrobielle Aktivität r wird aufgrund der durchgeführten Präinkubation auf $0,02$ gesetzt, d.h. es wird angenommen, dass zu Versuchsbeginn 2% der Mikroorganismenpopulation aktiv sind.

Durch HARDEN (1998) stehen der Konzentrationsverlauf für mineralischen Stickstoff N_{min} , mikrobiellen Stickstoff N_b und mikrobiellen Kohlenstoff C_b sowie die über den Versuchszeitraum kumulierten CO_2 -Emissionen zur Verfügung.

Tabelle 21 Anfangs- und Parameterwerte sowie Modelleffizienz für die Simulation der Konzentration an mineralischem N, mikrobiellem N und mikrobiellem C sowie der CO₂-Emissionen in einem Boden ohne Substratzufuhr. (Simulation 1-3 für ein Kontrollexperiment nach Daten von HARDEN (1998)).

| | Anfangswerte | | |
|--|--|---|---|
| Variable | Simulation 1 (Standardwerte) | Simulation 2* (neue Anfangswerte) | Simulation 3* (neue Parameterwerte) |
| C_b [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 375 | 279 | |
| N_b [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 63 | 60 | |
| C_d [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 450 | 1016 | |
| N_d [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 27 | 92 | |
| C_h [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 14175 | 13577 | |
| N_h [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 1658 | 1595 | |
| C_s [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 45 | 128 | |
| N_{min} [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 60 | | |
| r [-] | 0,02 | | |
| | | | |
| Parameter | Parameterwerte | | |
| α_{max} [Tag ⁻¹] | 0,4 | | 0,5 |
| $\mu NH4_{max}$ [Tag ⁻¹] | 1,1 | | 0,5 |
| | | | |
| Variable | Modelleffizienz | | |
| N_{min} | 0,738 | 0,942 | 0,781 |
| CO ₂ | 0,675 | 0,993 | 0,992 |
| N_b | n.b.** | -0,471 | 0,871 |
| C_b | n.b. | 0,226 | 0,314 |

* Ist in einer Zelle kein Wert angegeben ist, so entsprechen die Werte jeweils dem nächsten linksstehenden Wert in derselben Zeile. **n.b.: nicht berechnet, da mit Standardanfangswerten simuliert.

Simulationsergebnisse

Die gemessene N_{min} -Konzentration zeigt eine stetige Zunahme von 60 kg N ha⁻¹ 10 cm⁻¹ auf 111 kg N ha⁻¹ (siehe Abbildung 24a). Allerdings verläuft die Zunahme der N_{min} -Konzentration gegen Ende der Inkubationszeit deutlich langsamer als zu Beginn. Die Simulation von N_{min} mit Standardwerten zeigt ebenfalls eine durchgehende Netto-Mineralisierung, bleibt allerdings am Ende des Versuchszeitraumes mit 16 kg N ha⁻¹ 10 cm⁻¹ Differenz (entsprechend 14 % Abweichung) unter dem gemessenen Wert. Die Modelleffizienz ME liegt mit 0,738 noch recht hoch, täuscht allerdings über die systematische Unterschätzung hinweg.

Ähnlich verhält es sich mit den gemessenen und simulierten Werten für die CO₂-Emissionen: Während die Messwerte eine C-Mineralisierung von insgesamt 800 kg C ha⁻¹ 10 cm⁻¹ aufwei-

sen, liegt der simulierte Wert lediglich bei etwa der Hälfte, nämlich $443 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ (Abbildung 24b, hellgraue Kurve).

Die gemessene Konzentration an mikrobiellem Stickstoff N_b nimmt im Verlauf des Versuches auf 65 % der Ausgangskonzentration ab. Die Simulation liefert für die Biomasse-N-Konzentration mit Standardwerten für die mikrobielle Biomasse (C_b und N_b) ebenfalls eine Abnahme und zwar auf 75 % der Ausgangskonzentration. Für den Biomassekohlenstoff wurde zu Versuchsbeginn eine Zunahme der Konzentration um 7 % gemessen, der eine Abnahme auf 94 % der Ausgangskonzentration folgt, so dass die Konzentration an mikrobieller Biomasse etwa das Ausgangsniveau erreicht. Die Simulation mit Standardwerten liefert eine zu Beginn sehr starke, dann langsamere und stetige Abnahme der Biomassekonzentration C_b . Dies liegt vor allem an den sehr geringen Anfangskonzentrationen an löslichem Kohlenstoff C_s . Der Datenverlauf mit seinem anfänglichen Wachstum (ohne Zufuhr von Substrat) lässt eher drauf schließen, dass trotz der Präinkubation noch leicht verwertbares Substrat im Boden vorhanden war. Das gemessene C/N Verhältnis der mikrobiellen Biomasse nimmt damit im Verlauf der Inkubation leicht aber stetig von 4,7 auf 6,7 zu. Das simulierte C/N -Verhältnis der mikrobiellen Biomasse bleibt dagegen relativ konstant bei 6,0 - 6,1.

Nimmt man die vorrangige Fragestellung für deren Bearbeitung SIMULAT-NC eingesetzt werden soll, nämlich die Abbildung des Verlaufes der mineralischen Stickstoffkonzentration im Boden, so sind die Simulationsergebnisse mit Standardwerten als durchaus zufriedenstellend anzusehen. Mit Ausnahme der mikrobiellen Kohlenstoffkonzentration C_b vollzieht SIMULAT-NC auch mit Standardwerten für die Anfangskonzentrationen und Parameter die Trends der gemessenen Variablen richtig nach.

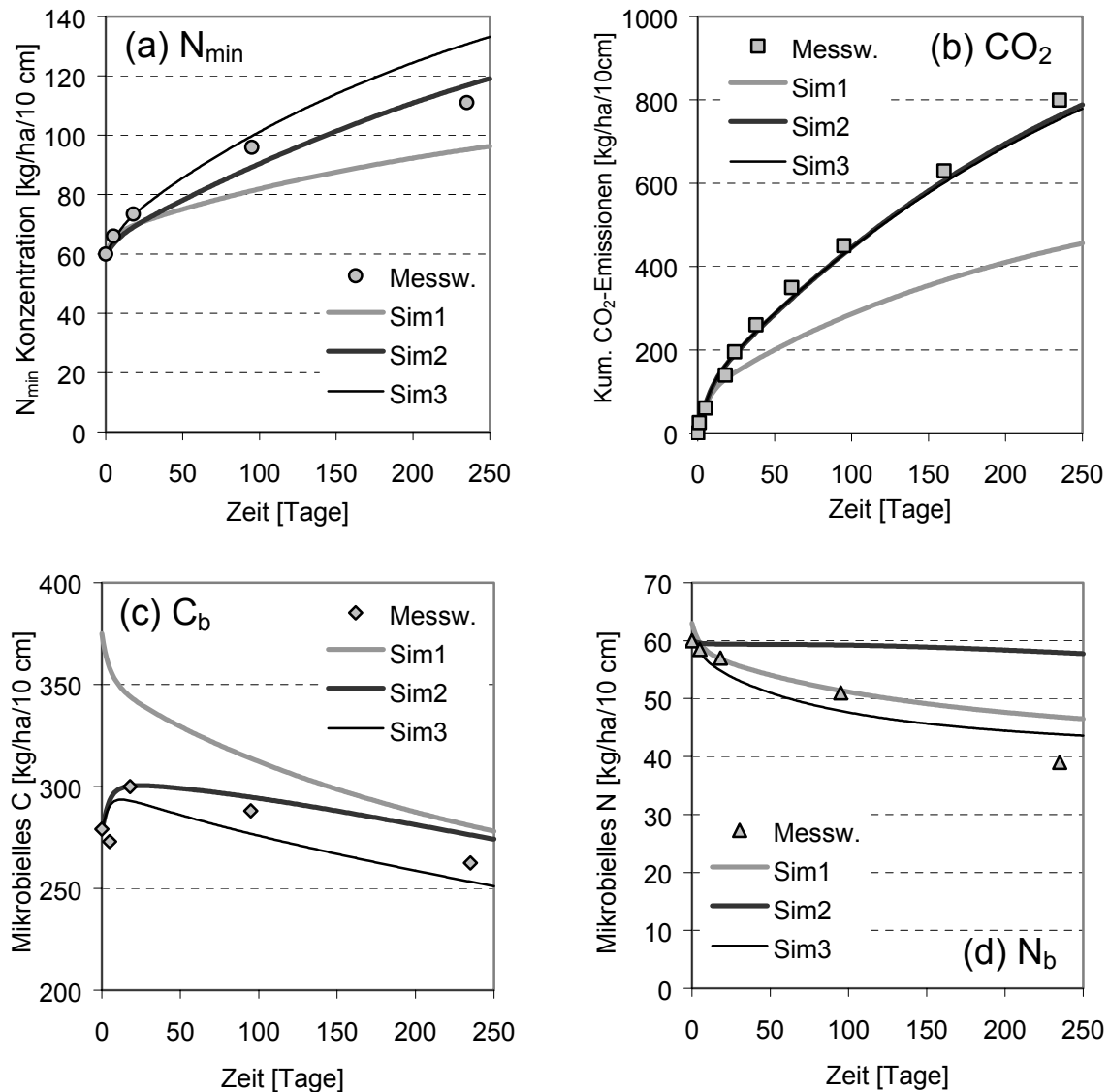


Abbildung 24 Verlauf der gemessenen und der simulierten Konzentrationen für ein Experiment ohne Substratzugabe nach Daten von HARDEN (1998). (a) N_{\min} -Konzentration (Sim1: ME=0,738; Sim2: ME=0,942; Sim3: ME=0,781), (b) kumulierte CO_2 -Emissionen (Sim1: ME=0,675; Sim2: ME=0,993; Sim3: ME=0,992), (c) Konzentrationsverlauf für mikrobiellen Stickstoff N_b (Sim1: ME= n.b.; Sim2: ME=-0,471; Sim3: ME=0,871) und (d) Konzentrationsverlauf für mikrobiellen Kohlenstoff C_b (Sim1: ME= n.b.; Sim2: ME=0,226; Sim3: ME=0,314).

Simulation 2 - Anpassung der Anfangswerte

Bei dieser Simulation wurden anstatt der Standardwerte die gemessenen Anfangskonzentrationen für die mikrobielle Biomasse (C_b und N_b) verwendet. Außerdem wurden die Anfangskonzentrationen für den löslichen Kohlenstoff C_s sowie den labilen organischen Kohlenstoff C_d und Stickstoff N_d neu geschätzt. Diese Schätzungen ergaben eine Erhöhung der C_d -Konzentration von $450 \text{ kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ (Simulation 1) auf $1016 \text{ kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$. Für den löslichen organischen Kohlenstoff C_s und den labilen organischen Stickstoff N_d ergab eine ungefähre Verdreifachung der Anfangskonzentrationen aus Simulation 1 die beste Übereinstimmung.

mung zwischen gemessenen und simulierten Werten (siehe Tabelle 21 und dunkelgraue Kurven in Abbildung 24).

Das Simulationsergebnis für den mineralischen Stickstoff N_{min} und die CO_2 -Emissionen wurde durch diese Maßnahme und hier insbesondere die Erhöhung der Konzentration an organischer Substanz entscheidend verbessert. Auch die Übereinstimmung der Modellergebnisse mit dem gemessenen Verlauf der Konzentration für den mikrobiellen Kohlenstoff C_b ist zufriedenstellend. Lediglich der Konzentrationsverlauf für den mikrobiellen Stickstoff N_b hat sich gegenüber der Simulation mit Standardwerten verschlechtert ($\text{ME} = -0,471$); die simulierte Konzentration bleibt nahezu konstant, anstatt abzunehmen, wie es die Daten nahe legen. Damit bleibt auch das mikrobielle C/N -Verhältnis nahezu konstant, anstatt zuzunehmen, wie es die Messwerte nahe legen. Die Simulation der mikrobiellen N -Dynamik zeigt damit offensichtlich noch Schwächen.

Simulation 3 – Variation von Parametern

Für die abschließende Simulation 3 erwies sich die Neuschätzung von zwei Parametern als ausreichend für eine Verbesserung der Simulationsergebnisse: Die maximale Sterberate der mikrobiellen Biomasse α_{max} wurde von 0,4 auf 0,5 Tag^{-1} erhöht (vgl. Tabelle 21), so dass der Verlauf der mikrobiellen N -Konzentration N_b jetzt gut nachvollzogen wird, was allerdings zur Folge hat, dass sich die Simulationsergebnisse für die Biomasse- C -Konzentration wieder leicht verschlechtern (siehe Abbildung 24c und d). Die erhöhte Sterberate hat außerdem zur Folge, dass die N_{min} -Konzentration sehr stark ansteigt, so dass die maximale Immobilisierungsrate μNH4_{max} von 1,1 auf 0,5 Tag^{-1} halbiert werden musste, um eine akzeptable Simulation der N_{min} -Konzentration zu erhalten (siehe Abbildung 24a).

3.2.4.2 Experiment 2 (Zugabe von Winterweizenstroh)

Für dieses Experiment wurde der gleiche Boden wie bei Experiment 1 mit umgerechnet 3750 $\text{kg Stroh ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ in gehäckselter Form versetzt. Dem Boden wurden auf diese Weise 1800 $\text{kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ sowie 20 $\text{kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ zugeführt. Es wird davon ausgegangen, dass 15 %, bzw. 270 $\text{kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ dieses Kohlenstoffes in löslicher Form vorliegen und damit dem löslichen organischen Kohlenstoffpool C_s zugeordnet werden können. Der verbleibende organische Kohlenstoff von 1530 $\text{kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ wird dem labilen organischen Kohlenstoffpool C_d zugeordnet. Die über das Stroh zugeführte N -Menge (20 $\text{kg ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$) wird vollständig dem labilen organischen Stickstoff N_d zugeführt.

Auch für dieses Experiment wurden drei Simulationen durchgeführt: In Simulation 1 werden Standardwerte für die mikrobielle Biomassekonzentration (C_b und N_b), sowie die Hintergrundkonzentrationen der organischen Modellkomponenten C_d^* , C_s^* und N_d^* genutzt. In Simulation 2 werden die in Experiment 1 geschätzten Werte für diese Hintergrundkonzentrationen verwendet, da mit dem selben Boden gearbeitet wird. Für Simulation 3 wird zusätzlich ein Teil der Modellparameter neu geschätzt.

Simulation 1 - Standardwerte für Parameter- und Anfangswerte

Simulation 1 wird mit den selben Parameterwerten und Standardwerten für die mikrobielle Biomasse (C_b und N_b), sowie den Hintergrundkonzentrationen für C_d^* , C_s^* und N_d^* gerechnet, die auch in Experiment 1 für Simulation 1 verwendet wurden (siehe Tabelle 21). Zu diesen Werten werden dann die jeweils zugegebenen Substratmengen addiert. Die Anfangswerte für Simulation 1 von Experiment 2 sind in Tabelle 22 zusammengefasst.

Tabelle 22 Anfangs- und Parameterwerte sowie Modelleffizienz für die Simulation des Konzentrationsverlaufes an mineralischem Stickstoff (N_{min}), mikrobiellem Stickstoff (N_b), mikrobiellem Kohlenstoff C_b sowie der CO_2 -Emissionen für einen Boden bei Zufuhr von Stroh (Daten von HARDEN, 1998).

| Variable | Anfangswerte | | |
|--|---------------------------------|--------------------------------------|--|
| | Simulation 1 (Standardwerte) | Simulation 2* (neue Anfangswerte) | Simulation 3* (neue Parameterwerte) |
| C_b [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 375 | 279 | |
| N_b [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 63 | 60 | |
| C_d [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 1980 | 2546 | |
| N_d [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 46 | 112 | |
| C_h [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 14175 | 13591 | |
| N_h [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 1658 | 1588 | |
| C_s [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 315 | 398 | |
| N_{min} [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 60 | | |
| r [-] | 0,02 | | |
| | | | |
| Parameter | Parameterwerte | | |
| ηCd_{max} [Tag ⁻¹] | 1,4 | | 1,6 |
| α_{max} [Tag ⁻¹] | 0,4 | | 0,6 |
| $\mu NH4_{max}$ [Tag ⁻¹] | 1,1 | | 5,2 |
| | | | |
| Variable | Modelleffizienz | | |
| N_{min} | 0,772 | 0,234 | 0,892 |
| CO_2 | 0,844 | 0,902 | 0,969 |
| N_b | n.b.** | -0,300 | 0,344 |
| C_b | n.b. | 0,760 | -0,002 |

* Ist in einer Zelle kein Wert angegeben ist, so entsprechen die Werte jeweils dem nächsten linksstehenden Wert in derselben Zeile. **n.b.: nicht berechnet, da mit Standardanfangswerten simuliert.

Für dieses Laborexperiment mit Zugabe von Weizenstroh wurde von HARDEN (1998) der zeitliche Verlauf von vier Variablen gemessen: (1) Die mineralische Stickstoffkonzentration (N_{min}), (2) die kumulierten CO_2 -Emissionen, (3) die mikrobielle Biomasse-C-Konzentration (C_b) und (4) die mikrobielle Biomasse-N-Konzentration (N_b).

Simulationsergebnisse

Die gemessenen N_{\min} -Konzentrationen zeigen zu Beginn des Experimentes eine Phase der Netto-Immobilisierung, der nach etwa einem Monat eine Mineralisierungsphase folgt (siehe Abbildung 25a). Die N_{\min} -Konzentration sinkt dabei von 60 auf 45 kg N ha⁻¹ 10 cm⁻¹ bzw. 75 % der Ausgangskonzentration ab, um bis zum Ende der Inkubation wieder auf 93 kg N ha⁻¹ 10 cm⁻¹ bzw. 155 % der Ausgangskonzentration anzusteigen. Das Konzentrationsminimum für N_{\min} bleibt damit während der Immobilisierungsphase weit über dem von CORBEELS et al. (1999) ebenfalls bei Strohzugabe gemessenen Wert von 4 kg N ha⁻¹ 10 cm⁻¹.

Der zeitliche Verlauf der Messwerte für die N_{\min} -Konzentration wird vom Modell mit Standardwerten für Anfangs- und Parameterwerte im Prinzip nachvollzogen. Für N_{\min} wird eine Modelleffizienz ME von 0,772 erreicht (vgl. Tabelle 22). Allerdings sind sowohl die N-Immobilisierung als auch die spätere N-Mineralisierung weniger stark ausgeprägt, als es die Messwerte nahe legen (siehe Abbildung 25a, hellgraue Kurve). Dies führt am Ende der Inkubationsperiode zu einer Unterschätzung der N_{\min} -Konzentration um 10 kg ha⁻¹ 10 cm⁻¹, ein Wert, der nach KERSEBAUM (1989) und anderen, zumindest für Freilandbedingungen, im Bereich der Messungenauigkeit liegen würde.

Die gemessenen CO₂-Emissionen belaufen sich über den gesamten Inkubationszeitraum auf umgerechnet 1850 kg CO₂-C ha⁻¹ 10 cm⁻¹. In der Simulation werden die CO₂-Emissionen mit 87 % des gemessenen Wertes leicht unterschätzt (siehe Abbildung 25b). Allerdings war eine Unterschätzung der CO₂-Emissionen zu erwarten, da die Auswertung von Experiment 1 ergibt, dass die Hintergrundkonzentration für die labile organische Substanz (C_d^* und N_d^*) mit den Standardwerten als viel zu niedrig angenommen wird.

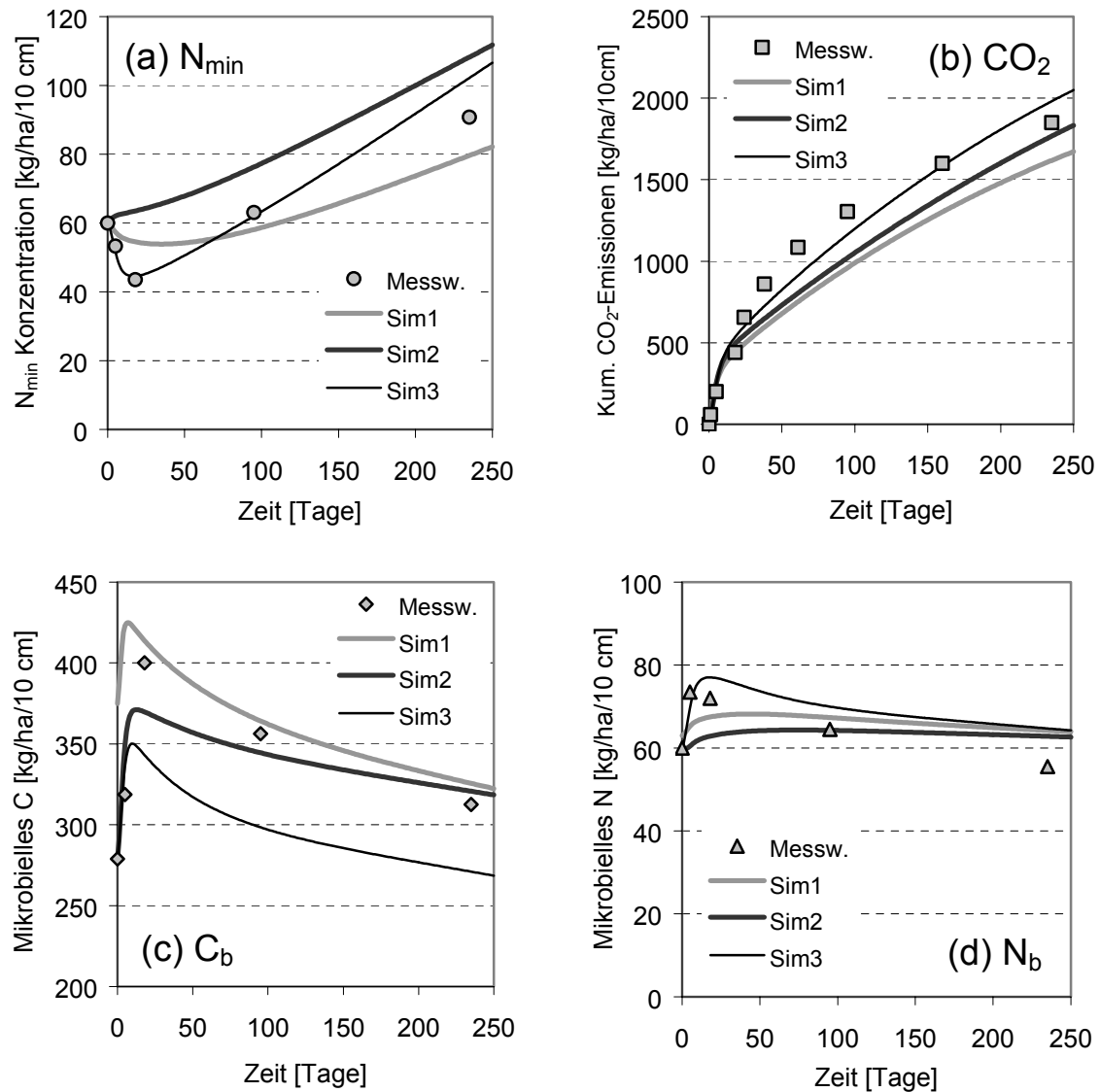


Abbildung 25 Gemessener und simulierter Verlauf von vier Zustandsvariablen für ein Laborexperiment mit Zugabe von Weizenstroh: (a) Konzentrationsverlauf für den mineralischen Stickstoff N_{min} (Sim1: ME=0,772; Sim2: ME=0,234; Sim3: ME=0,892), (b) Verlauf der kumulierten CO_2 -Emissionen (Sim1: ME=0,844; Sim2: ME=0,902; Sim3: ME=0,969), (c) Konzentrationsverlauf für den mikrobiellen Kohlenstoff C_b (Sim1: ME=n.b.; Sim2: ME=-0,300; Sim3: ME=0,344), (d) Konzentrationsverlauf für den mikrobiellen Stickstoff N_b (Sim1: ME=n.b.; Sim2: ME=0,760; Sim3: ME=-0,002); Daten von HARDEN (1998).

Für die mikrobielle Biomassekonzentration (C_b) hat HARDEN (1998) innerhalb der ersten 18 Tage ein Wachstum auf 143 % der Ausgangskonzentration gemessen. Bis zum Ende des Messzeitraumes erfolgt danach ein Absinken der C_b -Konzentration auf 112 % des Anfangswertes. Für die Simulation mit Standardanfangswerten für die mikrobielle Biomasse liegt die anfängliche Biomasse-C-Konzentration schon um 34 % höher als der zu Versuchsbeginn gemessene Biomasse-C-Wert. Ab Tag 18 werden die gemessenen Werte sehr gut nachvollzogen. Allerdings steigt die simulierte C_b -Konzentration damit nur auf 113 % der Ausgangskonzentration, um dann auf 87 % der Ausgangskonzentration abzusinken (siehe Abbildung 25c,

hellgraue Kurve). Der Trend im Verlauf der gemessenen Werte wird damit nachvollzogen, allerdings wiederum mit einer weniger ausgeprägten Dynamik, wie es schon bei der Simulation der N_{\min} -Konzentration zu beobachten ist. Der Grund für die geringere Dynamik bei der Simulation ist darin zu sehen, dass die Verfügbarkeit an direkt verwertbarem Substrat C_s , aber auch an C_d nur gering ist, so dass die Aktivität r der Mikroorganismenpopulation niedrig bleibt.

Ähnliches gilt für den Verlauf der mikrobiellen Biomasse-N-Konzentration N_b : Der Verlauf der Messwerte weist für N_b einen Anstieg auf 121 % der Anfangskonzentration auf, dem ein Absinken auf 93 % der Anfangskonzentration folgt. Das C/N -Verhältnis der mikrobiellen Biomasse erweitert sich dabei von 4,7 auf 5,6. Die Kurve für die simulierte N_b -Konzentration weist zwar ebenfalls einen Anstieg der Konzentration mit nachfolgendem Rückgang auf, aber wiederum mit einem flacheren Verlauf als ihn die Messwerte aufweisen (Abbildung 25d). Das simulierte C/N -Verhältnis der Mikroorganismen verengt sich im Gegensatz zum gemessenen C/N -Verhältnis von 6,0 auf 5,0.

Insgesamt betrachtet liefert die Simulation mit Standardwerten für Parameter und Anfangskonzentrationen sehr gute Resultate, da das Modell für alle Variablen den gemessenen Trend wiedergibt. Trotzdem wird im Folgenden versucht die Modellresultate mit Anfangswerten, die mit den gemessenen Werten übereinstimmen, noch einmal zu verbessern.

Simulation 2 - Anpassung der Anfangswerte

Für die zweite Simulation von Experiment 2 werden als neue Anfangswerte die gemessenen Konzentrationen für die mikrobielle Biomasse-C- und -N-Konzentration (C_b und N_b) eingesetzt. Außerdem werden die für Experiment 1 für denselben Boden geschätzten Hintergrundkonzentrationen für den C- und N-Anteil des labilen organischen Pools (C_d^* und N_d^*) sowie für den wasserlöslichen organischen C-Pool C_s^* verwendet (siehe Tabelle 22).

Diese Änderungen ergeben eine zufriedenstellende Simulation für die mikrobielle Biomasse-C-Konzentration C_b sowie die CO_2 -Emissionen (siehe Abbildung 25b und c). Auch das mikrobielle C/N -Verhältnis steigt jetzt leicht von 4,7 auf 5,0 an, d.h. es folgt eher dem Trend der gemessenen Werte. Die Simulation der N_{\min} -Konzentration ist dagegen wenig überzeugend; das Modellergebnis zeigt als Folge des zu Beginn sehr engen mikrobiellen C/N -Verhältnisses von Anfang an eine Stickstoffmineralisierung (siehe Abbildung 25a). Wie bei fast allen bisher simulierten Datensätzen ist daher auch hier eine Korrektur der Immobilisierungsrate für NH_4^+ notwendig.

Simulation 3 – Variation von Parametern

Da der simulierte Verlauf aller vier Variablen im Vergleich zu den Messwerten verbesserungswürdig ist, wurden hier die vier Parameter für eine Neuschätzung freigegeben, die auch für die Kalibrierung der Modellgleichungen genutzt wurden, die Mineralisierung/Immobilisierung und mikrobielles Wachstum abbilden. Diese Neuschätzung erbrachte

eine Änderung der Werte für die maximale Immobilisierungsrate $\mu NH4_{max}$, die maximale Abbaurate für die labile organische Substanz ηCd_{max} und die mikrobielle Sterberate α_{max} . Der vierte Parameter, die spezifische mikrobielle Wachstumsrate auf C_s (μCs_{max}) veränderte sich durch das Schätzverfahren erst in der dritten Nachkommastelle und wurde daher auf dem ursprünglichen Wert belassen.

Eine Erhöhung der maximalen NH_4^+ -Aufnahmerate $\mu NH4_{max}$ von 1,1 auf 5,2 Tag^{-1} lieferte für den Verlauf der N_{min} -Konzentration ein sehr zufriedenstellendes Ergebnis, die Modelleffizienz erhöhte sich von 0,234 in Simulation 2 auf 0,892 in dieser Simulation (vgl. Tabelle 22). Durch leichtes Heraufsetzen der maximalen Abbaurate für den labilen C-Pool ηCd_{max} konnte auch der Verlauf der simulierten CO_2 -Emissionen verbessert werden ($ME = 0,902 \rightarrow 0,969$).

Eine Erhöhung der mikrobiellen Sterberate α_{max} von 0,4 auf 0,6 Tag^{-1} verbessert zwar auch die Simulation der mikrobiellen Stickstoffkonzentration N_b ($ME = -0,30 \rightarrow 0,34$), allerdings auf Kosten der Simulation der mikrobiellen Kohlenstoffkonzentration C_b , deren Konzentrationsverlauf bei höherer Sterberate durch das Modell kräftig unterschätzt wird. Der Grund für die Diskrepanz zwischen gemessener und simulierter mikrobieller Biomasse liegt daran, dass die gemessene Biomasse-C-Konzentration bis zum 18. Tag doppelt so stark wächst wie die Biomasse-N-Konzentration innerhalb desselben Zeitraumes. Als Folge steigt das gemessene C/N-Verhältnis C_b/N_b sehr schnell von 4,7 auf 5,6 an und bleibt auf diesem Niveau, obwohl die N_{min} -Konzentration nie unter umgerechnet $40 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ absinkt. Das Modell simuliert mit der neuen Parametrisierung zwar zu Beginn des Experimentes ebenfalls einen leichten Anstieg des mikrobiellen C/N-Verhältnisses, allerdings wird dies im Verlauf der Inkubation enger und überschreitet nie einen Wert von 5,0. Natürlich ließe sich die Simulation der mikrobiellen Biomasse durch die Neuschätzung weiterer Parameter, wie z.B. einer Erhöhung der Substratnutzungseffizienz Y_{Cs} verbessern (hier nicht gezeigt). Es ist allerdings davon auszugehen, dass auch die gemessenen Werte für die Biomasse-N-Konzentration mit einem gewissen Fehler behaftet sind. So wurde die Konzentration an mikrobiellem Biomasse-N und -C von HARDEN (1998) mit Hilfe der Chloroform-Fumigations-Extraktions-Methode gemessen. Dabei wird davon ausgegangen, dass der extrahierbare C- und N-Anteil, der durch das Chloroform abgetöteten mikrobiellen Biomasse, eine Konstante ist. Inzwischen wurde jedoch von BLAGODATSKY & YEVDOKIMOV (1998) und anderen gezeigt, dass der extrahierbare Anteil mit der Menge an zugegebenem Substrat und mit der Inkubationsdauer variiert und nicht konstant gesetzt werden dürfte. Aufgrund dieser Unsicherheit in den Messwerten für die mikrobielle Biomasse-N-Konzentration wird auf eine Optimierung weiterer Parameter verzichtet.

3.3 Zusammenfassung und Diskussion

Die Simulationsläufe in diesem Kapitel hatten in erster Linie zum Ziel, das Modell einem qualitativen und quantitativen Test zu unterziehen sowie seine wichtigsten Eigenschaften herauszustellen. Die Ergebnisse der qualitativen Tests lassen sich wie folgt zusammenfassen:

1. Alle Modellvariablen liefern auch über Zeiträume bis zu einem Jahr stabile und plausible Werte. Allerdings zeigt die Erfahrung im Umgang mit dem Modell, dass bei jeder Änderung der Modellparameter ein neuer Test auf einen stabilen Verlauf der Zustandsvariablen durchgeführt werden sollte.
2. Die Modelldynamik weist, unter Berücksichtigung der begrenzten Datenlage für anaerobe und aerobe Zustände plausible Verläufe für die einzelnen Zustandsvariablen auf.
3. Die Verwendung des Konzeptes der mikrobiellen Aktivität r erlaubt, in Abhängigkeit von den Habitateigenschaften für die Mikroorganismen des Bodens, ein weites Spektrum an Abbaugeschwindigkeiten für die organische Substanz.

Bei den quantitativen Tests wurde besonderes Augenmerk auf die N-Mineralisierung und N-Immobilisierung unter aeroben Bedingungen gelegt, da für diesen Zweck ausreichend Daten zur Verfügung standen. Es wurden für jeden Datensatz drei Simulationen mit zunehmender Anpassung des Ausgangsmodells an die vorhandenen Daten durchgeführt (Simulation 1: Standardwerte für Anfangskonzentrationen und Parameterwerte; Simulation 2: Neuschätzung der Anfangswerte und Simulation 3: Neuschätzung von Parameterwerten). Die Ergebnisse der einzelnen Simulationen spiegeln den Einfluss wider, den eine zunehmende Datenverfügbarkeit über einen simulierten Standort auf die Qualität der Simulationsergebnisse und damit die Einsetzbarkeit des Modells hat. Um einen Überblick über die Gesamtheit der Simulationsergebnisse zu bekommen, werden hier noch einmal die N_{\min} -Simulationen aller Experimente gemeinsam ausgewertet (siehe Abbildung 26). Die Ergebnisse lassen sich folgendermaßen zusammenfassen:

1. Bei der Verwendung von Standardwerten für Anfangs- und Parameterwerte werden die N_{\min} -Konzentrationen vom Modell systematisch überschätzt. Die Abweichungen vom Messwert bleiben zwar für 54 % aller simulierten Werte ($n=41$) innerhalb einer durch ADDISCOTT & WHITMORE (1987) als akzeptabel gewerteten Grenze von $\pm 20 \text{ kg N ha}^{-1}$. Bei den restlichen Werten überschätzt das Modell die Konzentrationen um mehr als 20 kg N ha^{-1} , so dass die Modelleffizienz mit einem Wert von $ME=0,381$ recht niedrig ausfällt (siehe Abbildung 26a).
2. Werden die Anfangswerte neu geschätzt (die Modellparameter bleiben unverändert), steigt der Anteil der Werte, die innerhalb der Grenze von $\pm 20 \text{ kg N ha}^{-1}$ der gemessenen Werte liegen, auf 66 % (Abbildung 26b). Für alle Experimente mit Strohzugabe wird die Immobilisierung bzw. Mineralisierung von N_{\min} dann gut bis sehr gut simuliert, wenn der Startwert für das mikrobielle C/N -Verhältnis größer als 6,0 gewählt wird. Die Simulationen zeigen, dass das Mineralisierungs-/Immobilisierungsverhalten des Modells sehr sensitiv auf den Anfangswert des mikrobiellen C/N -Verhältnisses reagiert.
3. Die zusätzliche Anpassung einer begrenzten Zahl von Modellparametern führt zu einer weiteren Verbesserung der Übereinstimmung zwischen simulierten und gemessenen Werten: 90 % der simulierten N_{\min} -Werte liegen innerhalb der $\pm 20 \text{ kg}$ -

Grenze und bei nur 10 % der simulierten Werte erfolgt eine Unterschätzung von $>20 \text{ kg N ha}^{-1}$ (Abbildung 26c). Insbesondere die Variation der maximalen mikrobiellen Immobilisierungsrate für NH_4^+ ($\mu\text{NH}_{4_{\text{max}}}$) innerhalb einer Spanne von 0,5 bis $5,3 \text{ Tag}^{-1}$, d.h. um den Faktor 10, erbrachte hier jeweils hervorragende Ergebnisse. Bei ADDISCOTT & WHITMORE (1987) sowie KERSEBAUM (1989) variieren gemessene Netto-N-Mineralisierungsraten je nach Boden um einen Faktor 3 bis 4 und in einer von BENBI & RICHTER (2002) veröffentlichten Zusammenstellung sogar bis zu einem Faktor 16. Diese Bandbreite schreiben BENBI & RICHTER vor allem den unterschiedlichen mikrobiellen Umsatzraten in den untersuchten Böden zu. Allerdings sollten sich in einem Modell wie SIMULAT-NC, in dem die Variabilität der Umsatzraten der Mikroorganismenpopulation explizit berücksichtigt werden, die Variationen verringern. Hier sind allerdings zwei Faktoren zu berücksichtigen: (1) werden in den verwendeten Datensätzen nur von HARDEN (1998) gemessene Biomassekonzentrationen zur Verfügung gestellt, für die anderen Datensätze mussten die C_b -Konzentrationen abgeschätzt werden und (2) erfolgte die Strohzugabe bei HARDEN (1998) in gehäckselter Form, bei CORBEELS et al. (1999) jedoch in pulverisierter Form. Eine Substratzufuhr in pulverisierter Form dürfte zu einer schnelleren mikrobiellen Verwertung sowohl des C-Substrates als auch des mineralischem Stickstoffs führen; neben der Zusammensetzung des organischen Substrates spielt also auch die Darreichungsform eine Rolle bei der Geschwindigkeit der Substratumsätze.

Mit den Ergebnissen für die Simulation von Laborexperimenten, die die landwirtschaftliche Praxis der Substratzufuhr aufgreifen, wird deutlich, dass

1. SIMULAT-NC in der Lage ist, den Verlauf aller Modellvariablen plausibel abzubilden. Dies wird dahingehend interpretiert, dass die für den C- und N-Kreislauf relevanten Prozesse im Modell auf adäquate Weise berücksichtigt sind. Und
2. die substratabhängige mikrobielle Aktivität r das Modell ausreichend flexibel macht, um mit einer geringen Anzahl von organischen Stoffkompartimenten ein weites Spektrum an Umsatzraten abzubilden.

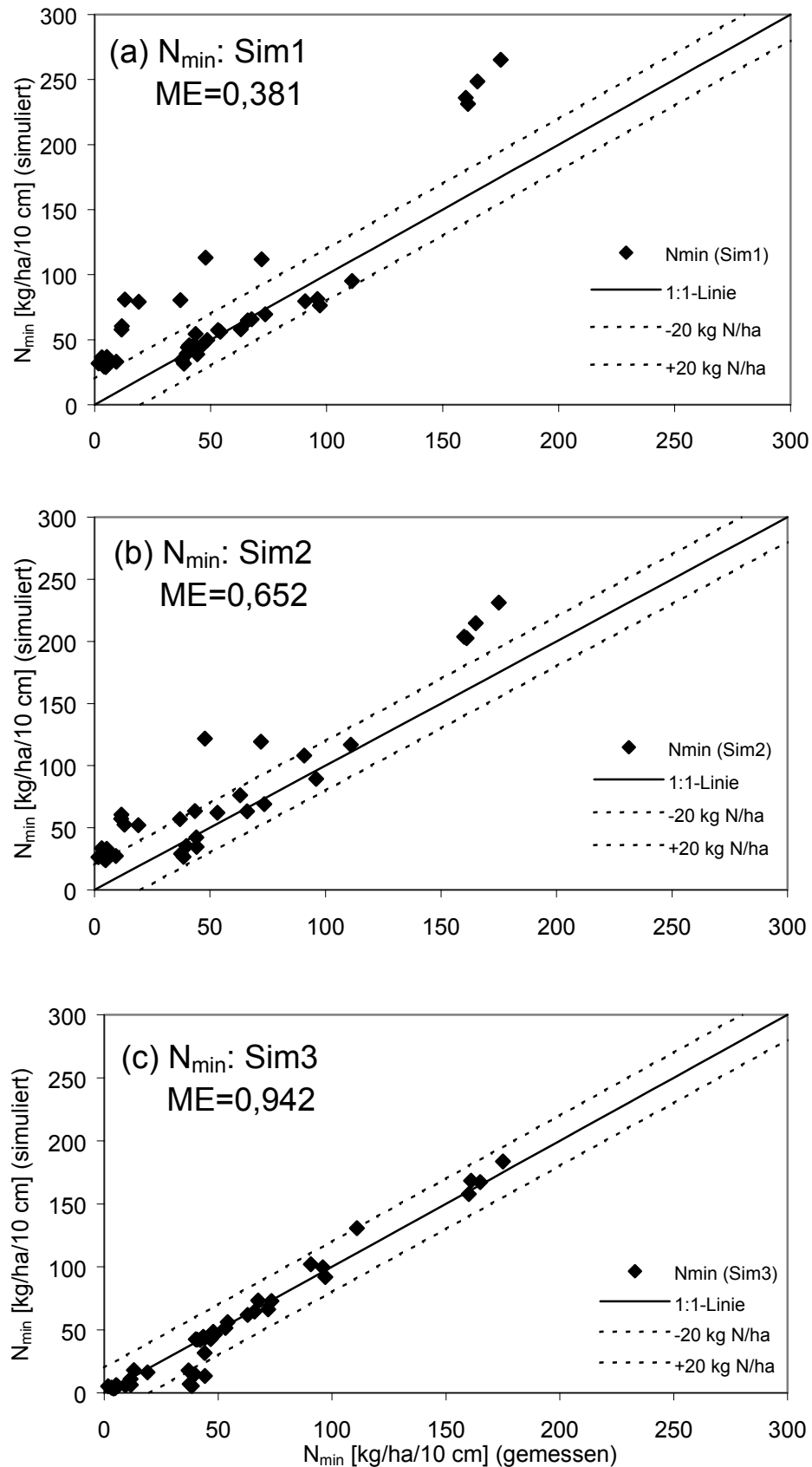


Abbildung 26 Übereinstimmung zwischen gemessenen und simulierten N_{\min} -Konzentrationen bei (a) der Verwendung von Standardwerten für Anfangswerte und Parameter (Sim1), (b) einer Neuschätzung der Anfangswerte (Sim2) und (c) einer zusätzlichen Neuschätzung einer begrenzten Anzahl von Parametern (Sim3).

4. MODELLANWENDUNG UND -TEST UNTER FREILANDBEDINGUNGEN

SIMULAT-NC wurde mit dem Ziel entwickelt, die Stickstoffumsätze in Böden von ackerbaulich genutzten Agrarökosystemen im norddeutschen Raum zu quantifizieren. Für die Berechnung der Stoffflüsse unter Freilandbedingungen wurde das N-Modell in das Ökosystemmodell SIMULAT integriert und für die Simulation eines Winterweizenbestandes im Jahr 1988/89 am Intensivuntersuchungsstandort des SFB 179 eingesetzt. Die Ergebnisse der im folgenden Kapitel beschriebenen Simulation werden im Hinblick auf drei Fragestellungen untersucht: Zum Einen wird der Konzentrationsverlauf für mineralischen Stickstoff und hier insbesondere Nitrat (NO_3^-) im Bodenprofil betrachtet, um zu prüfen, ob das Nitratverlagerungspotential einer für den Standort typischen Bewirtschaftungspraxis mit SIMULAT-NC abgeschätzt werden kann. Zum Zweiten wird der im Labormaßstab kalibrierte Modellansatz für die gasförmigen N-Verluste auf Plausibilität überprüft. Abschließend wird untersucht, in welchem Umfang der Konzentrationsverlauf des mineralischen Stickstoffes durch die Dynamik der mikrobiellen Biomasse relativ zur NH_4^+ -Sorption in den Tonmineralen des Bodens beeinflusst wird.

Im folgenden Kapitel werden nach einer kurzen Beschreibung des Ökosystemmodells SIMULAT die folgenden Ergebnisse beschrieben:

1. die Simulation von Bodentemperatur und Bodenwassergehalt,
2. die Simulation der Biomasse und des Biomasse-N-Gehaltes des Pflanzenbestandes sowie der Konzentrationsverlauf für mineralischen Stickstoff in der Bodenschicht 0-90 cm,
3. die Nitratverlagerung,
4. der Konzentrationsverlauf der mikrobiellen Biomasse und ihrer Aktivität r in Abhängigkeit von der Substratkonzentration und der Freisetzung organischer Substanz über die Pflanzenwurzel,
5. die gasförmigen N-Verluste über die Denitrifikation und
6. die Rolle der Ad- und Desorption von NH_4^+ an der Bodenmatrix.

4.1 Einbindung von SIMULAT-NC in das Ökosystemmodell SIMULAT

Das Ökosystemmodell SIMULAT wurde mit dem Ziel entwickelt, Wasser- und Stoffflüsse in Agrarökosystemen zu quantifizieren. Es besteht aus Teilmodellen für den Transport von Wasser, Stoffen und Wärme im Boden. Außerdem beinhaltet es ein Pflanzenwachstumsmodell, ein Schwefelmodell sowie ein Modell, dass Abbau und Sorption von Herbiziden beschreibt. Eine Darstellung der wichtigsten Modellteile ist in DIEKKRÜGER & ARNING (1995), und DIEKKRÜGER (1996) zu finden.

Im folgenden Kapitel werden kurz diejenigen Teilmodelle und Prozesse des SIMULAT-

Gesamtmodells beschrieben, die relevant sind für das Verständnis und die Interpretation der Simulationsergebnisse des NC-Modells. Dies sind in erster Linie das Pflanzenmodell, aber auch das Wasser- und Stofftransportmodell sowie das Bodentemperaturmodell.

4.1.1 Das Pflanzenmodell

Bei der gemeinsamen Betrachtung des Pflanzenwachstums und der Populationsdynamik der Mikroorganismen des Bodens ist zwischen zwei Arten von Beziehung zu unterscheiden: Zum Einen herrscht zwischen Pflanzen und Bodenorganismen eine Konkurrenz um Nährstoffe, insbesondere um Stickstoff als Makronährstoff. Auf der anderen Seite stellt die Pflanze als Primärproduzent über ihre Biomasse organische Substanz bereit, die als Energie- und Stofflieferant für den Biomasseaufbau der Mikroorganismen des Bodens dient. Die Mikroorganismen wiederum sind in der Lage aus der organischen Bodensubstanz Nährstoffe zu mineralisieren, die auch für das Wachstum der Pflanze essentiell notwendig sind. Aus diesem Verständnis der Wechselbeziehungen zwischen Pflanze und Mikroorganismenpopulation des Bodens heraus, wurden zwischen dem Pflanzenmodell und dem NC-Modell in SIMULAT drei Schnittstellen realisiert:

1. *N_{\min} -Aufnahme aus dem Boden:* Die Pflanze nimmt sowohl NO_3^- als auch NH_4^+ aus einer Bodenschicht auf, sobald diese Schicht durchwurzelt ist. Die Rate der NO_3^- - (bzw. NH_4^+ -) Aufnahme ist proportional zum NO_3^- -Anteil (bzw. NH_4^+ -Anteil) an der Gesamtkonzentration an mineralischem Stickstoff in einer Bodenschicht sowie einem Gradienten zwischen aktuellem und optimalem N-Gehalt der Pflanzenbiomasse in einem bestimmten Entwicklungsstadium. Dieser Ansatz wurde gegenüber dem Originalansatz von SCHRÖDER (1995), die die N-Aufnahme proportional zur Wurzelbiomasse und zur N_{\min} -Konzentration in einer Bodenschicht formuliert hat, verändert, da (1) keine Daten für die Wurzelbiomasse vorlagen und (2) der pflanzliche N-Entzug in manchen Bodenschichten oft so hoch war, dass das N-Modell nicht stabil lief.
2. *Kontinuierliche Lieferung direkt verwertbarer organischer Substanz:* Der Pflanzenbestand dient in SIMULAT-NC während der Vegetationsperiode als kontinuierliche Quelle organischer Substanz. Die Freisetzung von Exsudaten, Mucilaten und abgestorbener Wurzelbiomasse wird in Form einer konstanten Abbaurate proportional zur Wurzelbiomasse in jeder Bodenschicht simuliert. Für diese organische Substanz wird angenommen, dass sie direkt mikrobiell verwertbar ist. Die pro Tag freigesetzte Stoffmenge wird daher den Modellkompartimenten löslicher Kohlenstoff C_s und Ammonium NH_4^+ zugeordnet.
3. *Lieferung von Ernteresiduen:* Nach der Ernte wird dem Boden organische Substanz in Form von Wurzelbiomasse und Stoppeln (im Fall von Getreide als Feldfrucht) oder Rübenblatt (im Fall von Hackfrüchten als Feldfrucht) zugeführt. Diese organische Substanz, die das Pflanzenmodell in Form von Kilogramm Trockenbiomasse pro Hektar liefert, wird in C- und N-Einheiten umgerechnet und den Stoffkompartimenten labile organische Substanz (C_d , N_d) sowie mikrobiell direkt verwertbare (organische) Substanz (C_s , NH_4^+) in SIMULAT-NC zugeordnet.

Für eine detailliertere Beschreibung des Pflanzenmodells sei hier auf SCHRÖDER et al. (1995) und SCHRÖDER (1995) verwiesen.

4.1.2 Wasser- und Stofftransport

SIMULAT berechnet als Standortmodell eindimensional vertikale Verlagerungsprozesse im Boden. Die betrachtete Bodensäule kann sich dabei aus verschiedenen Bodenhorizonten zusammensetzen, die durch unterschiedliche Substratverteilungen voneinander abgegrenzt sind. Die einzelnen Horizonte sind wiederum in eine wählbare Anzahl von Bodenschichten unterteilbar, für die die einzelnen Zustandsvariablen des Teilmodells SIMULAT-NC berechnet werden. Da im Rahmen dieser Arbeit keine Änderungen am Wasser- oder Transportmodell vorgenommen wurden, erfolgt hier nur eine zusammenfassende Beschreibung der verwendeten Modellansätze. Eine detailliertere Beschreibung der beiden Teilmodelle ist in DIEKKRÜGER (1996) zu finden.

Die Transportprozesse in SIMULAT werden über partielle Differentialgleichungen abgebildet. Der Wasserfluss in der Bodenmatrix wird über die auf dem Darcy-Gesetz basierende Richards-Gleichung berechnet. In vereinfachter Form wird darin der Wasserfluss ausschließlich in vertikaler Richtung und proportional zum Gradienten des Matrixpotentials im Bodenprofil ermittelt:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = C(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K(\theta) \frac{\partial}{\partial z} (\Psi - z) \right) \pm Q \quad (62)$$

mit:

| | | |
|---------------|----------------------------------|--|
| θ : | volumetrischer Wassergehalt | $[\text{cm}^3 \text{ cm}^{-3}]$ |
| Ψ : | Matrixpotential | $[\text{hPa}]$ |
| $C(\Psi)$: | spezifische Wasserkapazität | $[\text{cm}^3 \text{ cm}^{-3} \text{ hPa}^{-1}]$ |
| z : | Tiefe | $[\text{cm}]$ |
| $K(\theta)$: | hydraulische Wasserleitfähigkeit | $[\text{cm Tag}^{-1}]$ |
| Q : | Quellen-/Senkenterm | $[\text{cm}^3 \text{ cm}^{-3} \text{ Tag}^{-1}]$ |

Der Stofftransport, der in SIMULAT-NC für die NO_3^- -Verlagerung und die Verlagerung von wasserlöslichem organischen Material (C_s) eine Rolle spielt, erfolgt mit dem Wasserfluss q . Er wird, analog zum Wasserfluss ausschließlich in vertikaler Richtung über eine Konvektions-Dispersionsgleichung abgebildet:

$$\frac{\partial(\theta c)}{\partial t} + \rho \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial \left(\theta D \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right) \right)}{\partial z} - \frac{\partial(q c)}{\partial z} \pm Q \quad (63)$$

mit:

| | | |
|----------|------------------------------|--------------------------------------|
| c : | Stoffkonzentration | [mg l ⁻¹] |
| ρ : | Trockenraumdichte des Bodens | [g cm ⁻³] |
| S : | sorbierte Stoffmenge | [mg kg ⁻¹] |
| D : | hydrodynamische Dispersion | [cm ² Tag ⁻¹] |
| q : | Wasserfluss | [cm Tag ⁻¹] |
| Q : | Quellen-/Senkenterm | |

Die hydrodynamische Dispersion D enthält dabei einen Dispersionsanteil, der in Abhängigkeit von der Porenwassergeschwindigkeit formuliert ist, sowie einen Diffusionsanteil. Der Stofftransport durch Makroporen wird in der verwendeten SIMULAT-Version nicht berücksichtigt. Eine ausführlichere Beschreibung des Ansatzes sowie die Definition der Randbedingungen ist bei DIEKKRÜGER (1996) zu finden.

4.1.3 Bodentemperatur

Die Temperatur des Bodens spielt für alle Umsetzungsprozesse in SIMULAT-NC eine wichtige Rolle. Der Wärmetransport im Boden erfolgt in SIMULAT, ähnlich wie beim Stofftransport über die Wärmeleitfähigkeit und die Konvektion und ist darüber mit dem Wasserfluss q gekoppelt:

$$c_h \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} - c_w q T \right) \quad (64)$$

mit:

| | | |
|-------------|-------------------------------|--------------------------------------|
| c_h : | volumetrische Wärmekapazität | [J m ⁻³ K ⁻¹] |
| T : | Temperatur | [°C] |
| λ : | Wärmeleitfähigkeit des Bodens | [W m ⁻¹ K ⁻¹] |
| c_w : | Wärmekapazität von Wasser | [J m ⁻³ K ⁻¹] |

Für die Ermittlung der volumetrischen Wärmekapazität c_h werden die Wärmekapazitäten des Wassers und des Feststoffanteils im Boden berücksichtigt. Die Wärmeleitfähigkeit λ wird in Abhängigkeit vom Wasser- und Tongehalt formuliert, der Quarzanteil des Bodens bleibt unberücksichtigt. Die obere Randbedingung ist durch die Lufttemperatur gegeben, die Temperatur des unteren Randes wird durch eine sinusförmige Funktion beschrieben. Diese Gleichung ist nur gültig, wenn Gefrieren und Auftauen des Bodens vernachlässigt werden (siehe auch DIEKKRÜGER, 1996).

4.2 Beschreibung des Untersuchungsstandortes

Das Gesamtmodell SIMULAT mit dem integrierten NC-Modell wurde für die Simulation des Schlages NK 278 am Intensivuntersuchungsstandort Neuenkirchen (NK) des SFB 179 eingesetzt.

Der Untersuchungsstandort liegt im Südosten Niedersachsens im Einzugsgebiet des Krummbach und hat eine Größe von etwa 16 km². Die vorwiegende landwirtschaftliche Nutzung besteht im Anbau von Winterweizen und Zuckerrüben. Die durchschnittliche Jahrestemperatur dieser Region liegt bei 8,6°C, die 10-jährige mittlere Niederschlagsmenge bei 590 mm pro Jahr. Der Grundwasserspiegel liegt im Winter etwa 1 m unter der Oberfläche und sinkt im Sommer auf mehr als 6 m Tiefe ab. Eine ausführliche Beschreibung des Untersuchungsstandortes ist bei OTHMER & BORK (1989) und MCVOY et al. (1995) zu finden.

4.2.1 Bodeneigenschaften

Die für die Simulation der Stickstoff- und Kohlenstoffdynamik relevanten Bodeneigenschaften wie Lagerungsdichte, organischer Kohlenstoff- und Stickstoffgehalt sind in Tabelle 23 bis zu einer Tiefe von 200 cm aufgeführt (Daten nach MCVOY et al., 1995). Beim Boden des simulierten Schlags NK 278 handelt es sich um eine schluffreiche Parabraunerde. Der organische C-Gehalt (C_{org}) beträgt in den obersten 30 cm des Bodens 1,02 % und fällt unterhalb einer Tiefe von 80 cm auf 10-13 % dieses Wertes ab. Das Verhältnis von organischer C-Konzentration zur Gesamt-N-Konzentration in der Bodenschicht 0-30 cm beträgt 8,5 und wird in tieferen Bodenschichten z.T. noch enger. Ausgehend von diesen Werten, insbesondere dem organischen C-Gehalt des Bodens sowie seinem C/N-Verhältnis, werden die Startwerte der Modellvariablen für 20 Schichten, d.h. bis zu einer Tiefe von 200 cm abgeleitet.

Tabelle 23 Bodeneigenschaften des Schlags NK 278 am Untersuchungsstandort Neuenkirchen basierend auf Daten in MCVOY et al. (1995).

| Tiefe [cm] | Ton [%] | Schluff [%] | Sand [%] | C _{org} [%] | C/N _{Boden} [-] | pH [CaCl ₂] |
|---------------|------------|----------------|-------------|-------------------------|-----------------------------|----------------------------|
| 0-30 | 19 | 79 | 2 | 1,02 | 8,5 | 7,0 |
| 30-50 | 23 | 76 | 1 | 0,36 | 7,2 | 7,0 |
| 50-80 | 18 | 80 | 1 | 0,25 | 6,9 | 7,1 |
| 80-90 | 16 | 83 | 1 | 0,13 | 5,9 | 7,1 |
| 90-140 | 18 | 80 | 2 | 0,12 | 7,1 | 7,1 |
| 140-170 | 16 | 59 | 24 | 0,09 | 6,4 | 7,7 |
| 170-180 | 6 | 6 | 88 | 0,11 | 13,8 | 7,8 |
| 180-200 | 20 | 66 | 14 | 0,13 | 9,3 | 7,7 |

4.2.2 Bewirtschaftung und Managementmaßnahmen

Die Art der Bewirtschaftung und Managementmaßnahmen wie z.B. die Art und Häufigkeit der Düngung haben Folgen für die saisonale C- und N-Dynamik im Boden. Der Schlag NK 278 wurde im Jahr 1989 mit Winterweizen bestellt. Die Aussaat erfolgte Ende September 1988 (vgl. Tabelle 24). Im Laufe der Vegetationsperiode des Jahres 1989 wurden über fünf Termine verteilt insgesamt 227 kg Stickstoff in Form einer Ammoniumnitrat-Harnstofflösung

(AHL) verabreicht. Nach der Ernte des Winterweizenbestandes Anfang August erfolgte neben einer Kaliumdüngung eine organische Düngung mit 20 t Schweinemist pro Hektar.

Tabelle 24 Managementmaßnahmen im Simulationszeitraum 1988/89 (MCVOY et al., 1995)

| Datum | Maßnahme | Sonstiges |
|----------|----------------------|---|
| 30.09.88 | Aussaat Winterweizen | Sorte Kanzler |
| 11.03.89 | N-Düngung | 67 kg N ha ⁻¹ als AHL (50 kg NH ₄ ⁺ -N, 17 kg NO ₃ -N) |
| 11.04.89 | N-Düngung | 47 kg N ha ⁻¹ als AHL (35 kg NH ₄ ⁺ -N, 12 kg NO ₃ -N) |
| 02.05.89 | N-Düngung | 31 kg N ha ⁻¹ als AHL (23 kg NH ₄ ⁺ -N, 8 kg NO ₃ -N) |
| 23.05.89 | N-Düngung | 46 kg N ha ⁻¹ als AHL (34 kg NH ₄ ⁺ -N, 12 kg NO ₃ -N) |
| 11.06.89 | N-Düngung | 36 kg N ha ⁻¹ als AHL (27 kg NH ₄ ⁺ -N, 9 kg NO ₃ -N) |
| 08.08.89 | Ernte | Ernteresiduen bleiben auf dem Feld |
| 15.08.89 | K-Düngung | 320 kg K ₂ O ha ⁻¹ |
| 27.08.89 | Organische Düngung | 20000 kg Schweinemist ha ⁻¹ mit 140 kg N |

Die stoffliche Zusammensetzung der AHL-Düngung ist bekannt. Für die Zusammensetzung der organischen Düngung, d.h. des Schweinemistes müssen Annahmen gemacht werden, da MCVOY et al. (1995), außer der mit dem Mist verabreichten N-Menge, keine weiteren Informationen über diese Düngergabe liefern.

Die mit dem Mist zugeführte Menge an organischem C und N wird aus Analysen von MAHIMAIRAJA et al. (1995) abgeleitet. Es ist allerdings zu beachten, dass diese Analysenwerte auf der Untersuchung von nur einer Probe Frischmist beruhen. Mist kann jedoch, je nach Bedingungen der Tierhaltung sowie Lagerungsart und -dauer in seiner Zusammensetzung schwanken. Insbesondere die Stickstoffverluste über Ammoniakausgasung sind schwer einzuschätzen. Von MAHIMARAIJA et al. (1995) werden Wassergehalt, Gesamt-C- bzw. Gesamt-N-Gehalt, sowie der Gehalt an löslichen organischen C- und N-Komponenten angegeben.

Die mit dem Mist zugeführte Menge an labilem C (C_d) sowie N (N_d) wird aus der Differenz zwischen dem Gesamt-C- bzw. N-Gehalt und den entsprechenden löslichen Komponenten ermittelt. Die Zuordnung der Anteile zu den organischen Modellkompartimenten (C_d , C_s , N_d) sowie zum NH₄⁺-Pool ist in Tabelle 25 zu finden. Lediglich der Gesamt-N-Gehalt wird an die von MCVOY et al. gelieferten Daten angepasst, d.h. gegenüber dem Wert von MAHIMARAIJA et al. (1995) abgesenkt; hier wird lediglich das Verhältnis von löslichem zu nicht-löslichem N übernommen.

Tabelle 25 Zusammensetzung von frischem Schweinemist (80 % Wassergehalt, Daten von MAHI-MARAIJA et al., 1995) sowie Mengenzuordnung zu den Modellkompartimenten.

| Modell-kompartiment | Zusammensetzung Schweinemist | |
|------------------------------|-------------------------------------|--|
| | Anteil [% der Trockensubstanz] | Menge je 20000 kg Mist [kg ha ⁻¹] |
| C_{total} | 36,7 | 1468 |
| C _s | 4,2 | 168 |
| C _d | | 1300 |
| N_{total} | 3,5 | 140 |
| NH ₄ ⁺ | 0,07 | 26 |
| NO ₃ ⁻ | < 0,01 | 0 |
| N _d | | 114 |

Unter diesen Annahmen wurden dem Boden Ende August 1989 mit der Mistgabe von 20 t ha⁻¹ somit 1468 kg organischer Kohlenstoff sowie nach MCVOY et al. (1995) 140 kg Stickstoff zugeführt, von dem angenommen wird, dass er zu 81 % aus organisch gebundenem N (N_d) besteht.

4.3 Simulationsexperiment

Im Rahmen des SFB 179 wurden am Untersuchungsstandort Neuenkirchen im Zeitraum 1988 bis 1992 regelmäßige Feldmessungen durchgeführt, die für einen Modelltest zur Verfügung stehen. Es erfolgt eine Simulation von 13 Monaten im Zeitraum 1988/89, da für dieses Jahr die Datendichte am höchsten war.

Es stehen in unterschiedlichen zeitlichen Abständen aufgenommene Messwerte für die folgenden Modellvariablen zur Verfügung:

1. die NO₃⁻-Konzentrationen in den Tiefen 0-30, 30-60 und 60-90 cm;
2. die NH₄⁺-Konzentrationen in den Tiefen 0-30, 30-60 und 60-90 cm;
3. der volumetrische Wassergehalt bis zu einer Tiefe von 150 cm;
4. die Lufttemperatur;
5. die oberirdische Pflanzenbiomasse und
6. der Stickstoffgehalt des Pflanzenbestandes.

Für die Simulation wurden drei Parameter neu bestimmt bzw. geändert, für die keine Modellvalidierung mit Labordaten durchgeführt wurde: Dies war zum Einen der bodenspezifische Sorptionskoeffizient k_c für das in der Bodenmatrix sorbierte Ammonium NH_4^+ (siehe Gleichung 53 in Kapitel 2), der mit Hilfe der gemessenen NH₄⁺-Konzentration in den obersten 30 cm des Bodens abgeschätzt wurde. Außerdem führte der Originalparametersatz über Zeiträume von mehreren Wochen zu unrealistisch hohen NO₂⁻-Konzentrationen von bis zu 20 kg ha⁻¹ 10 cm⁻¹ Bodenschicht. Um die Nitrit-Ansammlung im Boden unter aeroben und anaeroben Bedingungen zu verringern, wurde der mikrobielle Erhaltungsumsatz auf NO₃⁻ (mn_{NO_3}) unter anaeroben Bedingungen im Verhältnis zum kalibrierten Parameterwert um den Faktor 10

vermindert. Außerdem wurde die maximale Nitrifikationsrate μ_{n2max} für den zweiten Nitrifikationsschritt ($\text{NO}_2^- \rightarrow \text{NO}_3^-$) verdoppelt.

Weitere Annahmen betreffen die organische Substanz, die vom SIMULAT-Pflanzenmodell zum Zeitpunkt der Ernte an SIMULAT-NC übergeben wird. Das Pflanzenmodell liefert die Masse der auf dem Feld verbleibenden Ernteresiduen in kg Trockenbiomasse pro Hektar, so dass diese für SIMULAT-NC in C- und N-Einheiten umgerechnet werden muss. Es wird angenommen, dass der C-Gehalt der Pflanzenbiomasse 45 % beträgt. Bei den Ernteresiduen eines abgeernteten Weizenbestandes handelt es sich entweder um die gesamte Strohbiomasse (Halm und Blattbiomasse bei Strohdüngung) und die im Boden verbleibende Wurzelbiomasse, oder wie im hier präsentierten Fall, nur um die Stoppeln und die Wurzelbiomasse eines Weizenbestandes. Beim C/N-Verhältnis der Pflanzenbiomasse wird zwischen Wurzelbiomasse und oberirdischer Biomasse unterschieden.

Das C/N-Verhältnis der Wurzelbiomasse ist zum Zeitpunkt der Ernte enger als das der oberirdischen Ernteresiduen (KLIMANEK, 1991); es wird ein Wert von 10,0 angenommen. Für die oberirdischen Ernterückstände von Weizen (Stroh bzw. Stoppeln) müssen ebenfalls Annahmen für das C/N-Verhältnis gemacht werden, da Messwerte und simulierte Werte lediglich für die oberirdische Gesamtbiomasse vorliegen, der N-Gehalt von Halm und Ähre aber große Unterschiede aufweist. Nimmt man für das Korn zur Ernte einen N-Gehalt von 2% der Trockenbiomasse an (NIESEL-LESSETHIN, 1983), so lässt sich für die Stoppelbiomasse das C/N-Verhältnis auf einen Wert von 50 abschätzen. Zum Zeitpunkt der Ernte werden 30 % der Halmbiomasse (= Stoppeln) aus dem Pflanzenmodell in die oberste Bodenschicht (0 - 10 cm) von SIMULAT-NC überführt. Von diesen 30 % Halmbiomasse fließen 30 % des C- bzw. N-Anteils in die Modellkompartimente C_s bzw. NH_4^+ und 70 % in die Kompartimente für die labile organische Substanz (C_d bzw. N_d). Aus der Wurzelbiomasse fließen nach der Ernte 40 % des Wurzel-C bzw. -N in den mikrobiell schnell verwertbaren Pool (C_s bzw. NH_4^+) und 60 % in den labilen Pool (C_d bzw. N_d).

4.3.1 Anfangswerte

Wie auch für die Simulation der Laborexperimente müssen für die Simulation der Freilandexperimente die Anfangswerte für diejenigen Modellvariablen abgeschätzt werden, für die keine Messwerte vorliegen.

Die Anfangswerte für die mikrobielle C- und N-Konzentration in der Bodenschicht 0-30 cm wurden aus Messwerten von HARDEN (1998) abgeschätzt. Diese Daten wurden vom simulierten Schlag NK 278 unter einem Winterweizenbestand in den Jahren 1994 und 1995 erhoben. Die Konzentration an mikrobiellem C (C_b) betrug im Mittel über die beiden Untersuchungsjahre $379 \text{ kg C ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ (vgl. Tabelle 26) und lag damit bei 2,5 % des organischen C-Gehaltes im Boden. Die durchschnittliche Konzentration an mikrobiellem Stickstoff (N_b) belief sich auf $67 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$. Der Startwert für das mikrobielle C/N-Verhältnis beträgt somit 5,7. Für die Simulation wird eine homogene Verteilung der Mikroorganismen innerhalb

der obersten 30 cm des Bodens angenommen. In den tieferen Bodenschichten (70 - 90 cm) fällt der Anteil an mikrobiellem Biomasse-C auf 0,5-0,7 % der organischen Bodensubstanz (LAVAHUN et al., 1996). Der Startwert für das mikrobielle C/N-Verhältnis wird innerhalb des Bodenprofils als konstant angenommen.

Tabelle 26 Startwerte für die mikrobiellen und organischen Modellkompartimente für das Bodenprofil 0-90 cm am Standort Neuenkirchen (NK 278) abgeleitet aus Daten von HARDEN (1998) und MCVOY et al. (1995).

| Tiefe [cm] | C _b | N _b | C _s | C _d | N _d | C _h | N _h |
|---------------|--|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| | [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | | | | | | |
| 5 | 379 | 66 | 44 | 441 | 26 | 13836 | 1637 |
| 15 | 379 | 66 | 44 | 441 | 26 | 13836 | 1637 |
| 25 | 379 | 66 | 44 | 441 | 26 | 13836 | 1637 |
| 35 | 67 | 12 | 16 | 160 | 9 | 5086 | 719 |
| 45 | 67 | 12 | 16 | 160 | 9 | 5086 | 719 |
| 55 | 49 | 9 | 12 | 118 | 7 | 3746 | 550 |
| 65 | 27 | 5 | 12 | 118 | 7 | 3768 | 553 |
| 75 | 13 | 2 | 6 | 64 | 4 | 2049 | 355 |
| 85 | 11 | 2 | 6 | 64 | 4 | 2051 | 355 |

Als Anfangswerte für die labilen organischen Kompartimente (C_d und N_d) werden die Standardwerte aus Kapitel 3 verwendet, d.h. 3 % der organischen Bodensubstanz werden dem labilen C-Pool C_d zugeordnet. Bei einer Probesimulation ergab sich, dass die C_d-Konzentration nach Ablauf eines Jahres unter einem Winterweizenbestand wieder ungefähr diesen Wert erreicht. Das C/N-Verhältnis dieser organischen Fraktion wird auf 17 festgesetzt.

Der Startwert für die mikrobielle Aktivität *r* wird auf 0,01 gesetzt, da der relative Bodenwassergehalt zu Beginn der Simulationsperiode einen Wert von 0,61 überschreitet (siehe Abbildung 27). Damit herrschen anaerobe Bedingungen in den obersten Bodenschichten, so dass angenommen werden kann, dass nur ein geringer Teil der Mikroorganismenpopulation im Boden, nämlich die Denitrifikanten aktiv sind. Für die tieferen Bodenschichten (> 30 cm) wird eine mikrobielle Aktivität *r* von 0,003 angenommen.

Als Anfangskonzentrationen für die mineralischen N-Verbindungen werden Messwerte verwendet (NO₃⁻ und NH₄⁺), oder sie werden auf 1,0 gesetzt (NO₂⁻, N₂O, N₂).

4.3.2 Simulationsergebnisse

Im Laufe der Simulationsperiode Oktober 1988 bis Oktober 1989 wurden dem Boden insgesamt etwa 367 kg Stickstoff in Form von AHL bzw. Mist zugeführt. Der gemessene Pflanzenentzug betrug 263 kg N ha⁻¹, der simulierte Entzug 216 kg Pflanzen-N ha⁻¹. Der N-Überschuss beträgt in diesem Jahr somit 104 kg (gemessen) bzw. 151 kg ha⁻¹ (simuliert) und wird damit durch das Modell überschätzt. Die Gründe für diese Überschätzung sowie der Verbleib des

laut dieser vereinfachten Bilanz überschüssigen Stickstoffes werden im folgenden Kapitel beschrieben.

4.3.2.1 *Witterungsbedingungen*

Wechselnde Witterungsbedingungen spielen eine wichtige Rolle für die Stofftransformationen im Boden. In SIMULAT-NC werden als Witterungsbedingungen die Änderungen von Bodentemperatur und Bodenwassergehalt berücksichtigt, die von den entsprechenden SIMULAT-Teilmodellen berechnet werden. Die Ergebnisse der Simulation für den Bodenwassergehalt und die Tagesmittelwerte der Bodentemperatur werden daher im folgenden Abschnitt kurz vorgestellt.

Die Niederschläge als Ausgangspunkt für den Bodenwassergehalt belaufen sich für den Simulationszeitraum 1. Oktober 1988 bis 30. Oktober 1989 auf insgesamt 562 mm. Die größte monatliche Niederschlagsmenge (82 mm) ist für den Dezember 1988 zu verzeichnen, die geringste, mit 8 mm für den Mai 1989 (siehe Abbildung 27a). Der simulierte und gemessene Wassergehalt des Bodens ist in Abbildung 27a exemplarisch für die Bodenschicht von 10-20 cm Tiefe abgebildet. Demnach hat das Wassermmodell von SIMULAT die Tendenz die Wassergehalte im Winter eher zu unterschätzen, während die Wassergehalte im Sommer leicht überschätzt werden. Der Bodenwassergehalt erfüllt in SIMULAT-NC zwei Funktionen: Er kann zum Einen limitierend auf die mikrobielle Aktivität r wirken und außerdem die heterotrophe Denitrifikation „aktivieren“ sobald der relative Wassergehalt Θ_{rel} einen Wert von 0,61 überschreitet. Die Unterschätzung des Wassergehaltes während der Wintermonate hat keine limitierende Wirkung auf die mikrobielle Aktivität r , da im Winter die Temperaturen so niedrig sind, dass sie eher zum limitierenden Witterungsfaktor werden als der Bodenwassergehalt. Für die Simulation der heterotrophen Denitrifikation könnte die Unterschätzung der Wassergehalte im Winter jedoch zu einer Unterschätzung der gasförmigen N-Verluste führen.

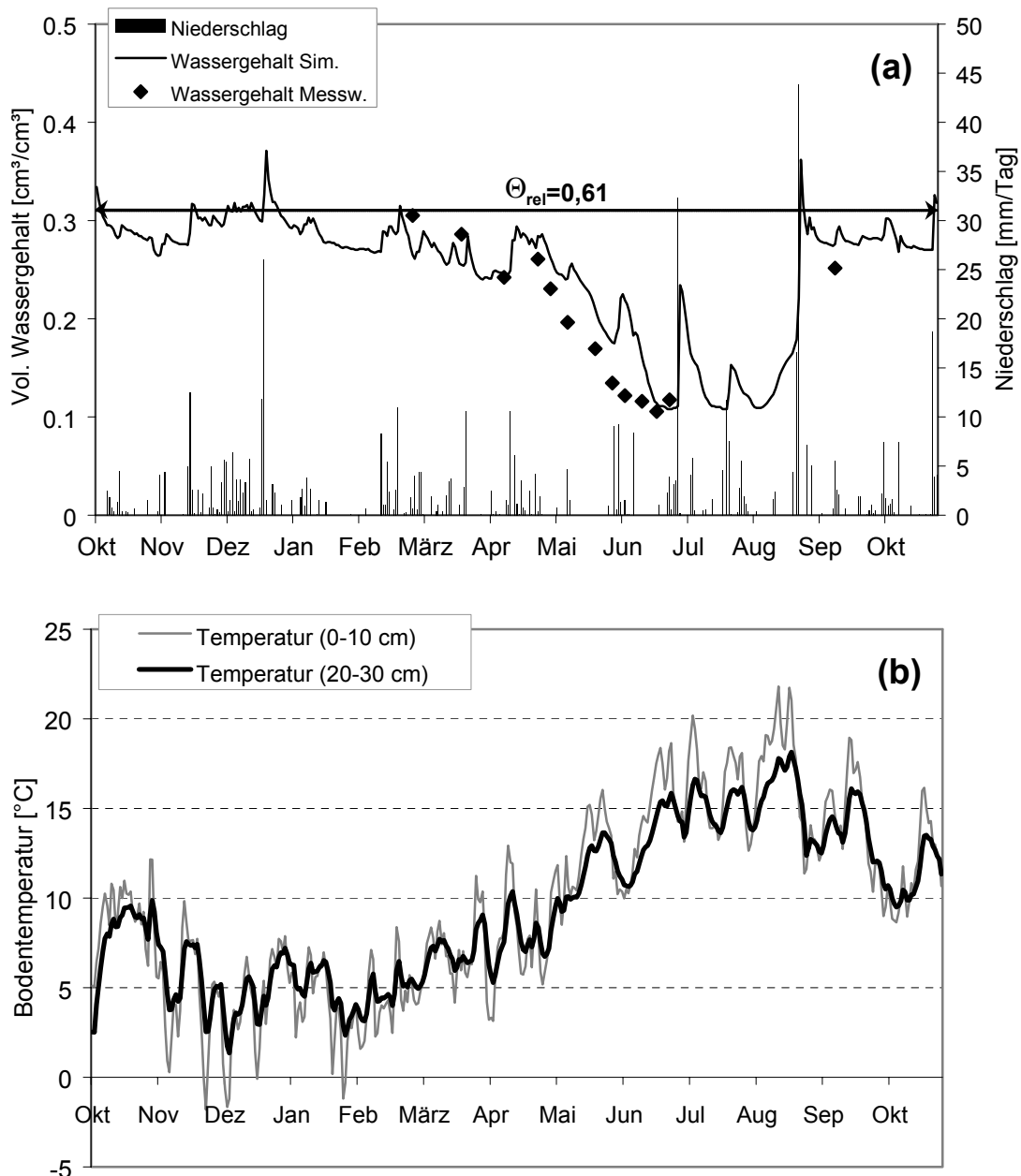


Abbildung 27 Witterungsbedingungen am Untersuchungsstandort Neuenkirchen (NK 278) im Zeitraum Oktober 1988 bis Oktober 1989. (a) Gemessener und simulierter Wassergehalt in der Bodenschicht 10-20 cm sowie tägliche Niederschlagsmengen. (b) Simulierte Tagesmitteltemperaturen in der Bodenschicht 0-10cm und 20-30 cm.

Die in Abbildung 27b dargestellten Tagesmitteltemperaturen für die Bodenschicht 10-20 cm zeigen einen für mitteleuropäische Verhältnisse typischen Verlauf: Den Temperaturminima in den Monaten Dezember bis Februar folgt ein Anstieg bis auf ein Maximum in den Monaten Juni bis August. Die tiefsten Temperaturen werden in dieser Bodenschicht mit 0,1 °C Anfang Dezember erreicht, Minusgrade (Minimum -2°C) werden nur an drei Terminen im Dezember und im Februar für die obersten 10 cm des Bodens simuliert (hier nicht gezeigt). Das Temperaturmaximum wird in der Bodenschicht 10-20 cm mit 19,5°C an zwei Terminen im August erreicht.

4.3.2.2 Pflanzenwachstum

Die Wachstumsdynamik des Pflanzenbestandes prägt während der Vegetationszeit die Stoffumsätze im Boden. Eine ausreichend gute Simulation des Biomassewachstums, der damit einhergehenden N-Aufnahme der Pflanzen, aber auch der Versorgung des Bodens mit organischer Substanz über die Wurzelausscheidungen ist daher von entscheidender Bedeutung für die Güte der Simulation der N-Umsätze in diesem Zeitraum.

Am Pflanzenmodell von SIMULAT (SCHRÖDER, 1995) wurden eine Reihe kleinerer Änderungen vorgenommen, um die Simulation der N-Umsätze zu verbessern. So wurde die Geschwindigkeit der N-Aufnahme vor dem Stadium der Bestockung, d.h. dem Beginn des Blattwachstums (Ende März) gedrosselt, da sich die N-Aufnahme des Bestandes schon über die Monate Dezember und Januar auf 50 kg N ha^{-1} belief, ohne dass der zeitliche Verlauf dieser N-Bindung durch gemessene Daten belegt wäre. Außerdem wurde der Saatzeitpunkt für Winterweizen für die Simulation, im Vergleich zu dem bei MCVOY et al. (1995) angegebenen Datum (30.9.88) um 14 Tage auf den 13.10.88 nach hinten verschoben³, da so (1) die Zeitpunkte für die einzelnen Entwicklungsstadien des Winterweizenbestandes besser mit den gemessenen Werten übereinstimmen und (2) der N-Entzug der Pflanze mit 220 kg N ha^{-1} weniger stark unterschätzt wird als in der ursprünglichen Fassung mit einem maximalen N-Entzug von 207 kg N ha^{-1} (hier nicht abgebildet). Laut Messdaten erreicht der N-Entzug durch den Winterweizenbestand in diesem Jahr insgesamt 263 kg N ha^{-1} .

Wie in Abbildung 28a zu sehen ist, hat die Variation der Parameter des Denitrifikations- und des Nitrifikationsmodells keinen Einfluss auf den Verlauf des oberirdischen Biomassewachstums der Pflanze. Das Modell vollzieht den Datenverlauf im Prinzip sehr gut nach. Lediglich im Verlauf des Mai wird der Biomassezuwachs vom Modell stark unterschätzt. Die Gesamtbiomasse kurz vor der Ernte wird vom Modell ebenfalls um rund 10 % unterschätzt. Diese Tendenz findet sich auch bei der Simulation des Pflanzenstickstoffes wieder, da der N-Entzug der Pflanze über eine auf die Pflanzenbiomasse bezogene Referenzkonzentration modelliert wird. Dies hat zur Folge, dass die im Pflanzenbestand gebundene N-Menge den gesamten Mai über um bis zu 90 kg N ha^{-1} unterschätzt wird (siehe Abbildung 28b). Die Unterschätzung des Pflanzen-N kurz vor der Ernte beträgt noch 18 %.

³ Bei Schröder (1995) ist für diesen Bestand sogar erst der 7.11.88 als Saattermin angegeben.

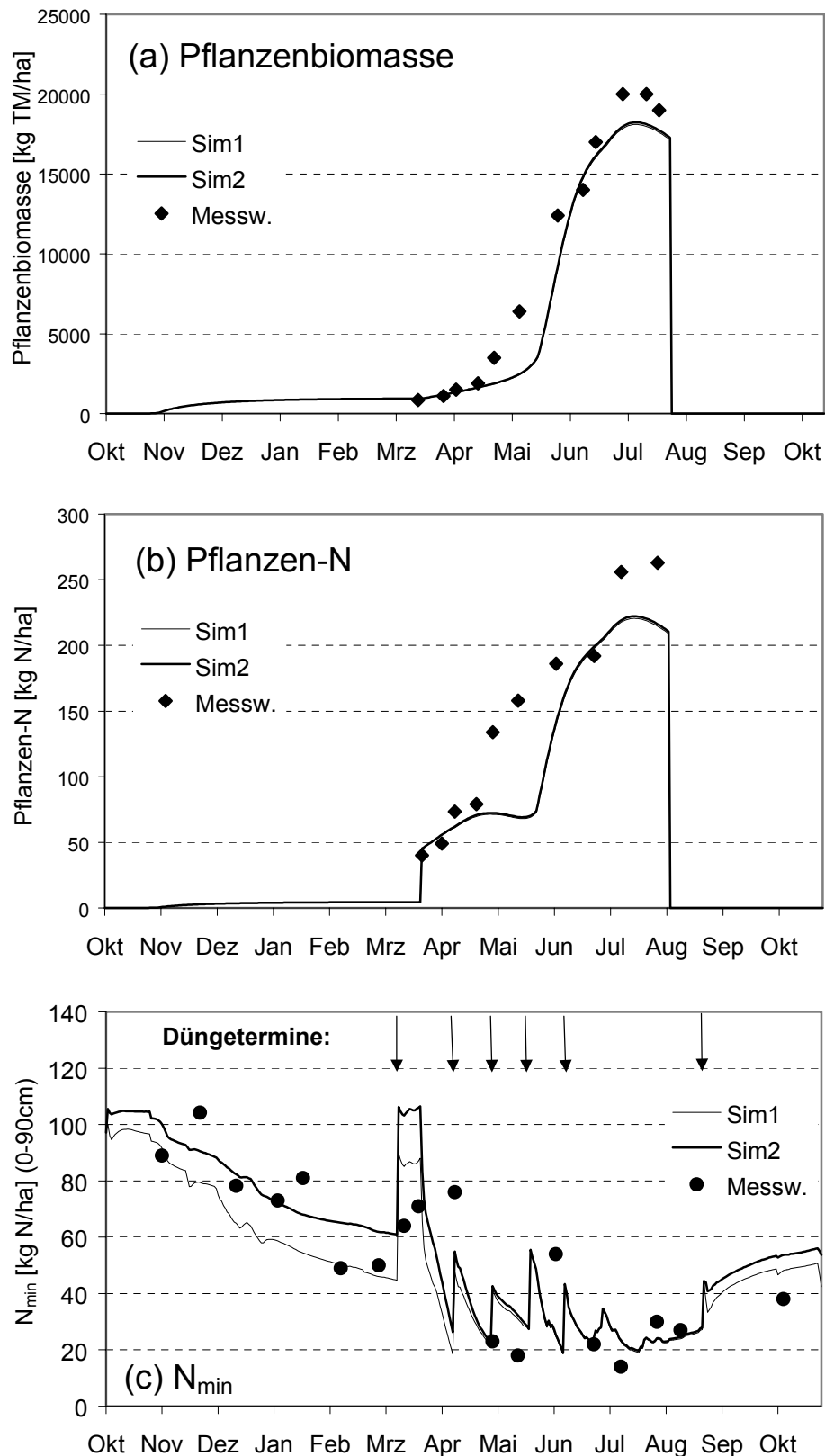


Abbildung 28 Simulierte und gemessene Werte für (a) den oberirdischen Biomassezuwachs (Halm + Blatt + Ähre) eines Winterweizenbestandes in kg Trockenmasse (TM) pro Hektar, (b) die N-Akkumulation im Pflanzenbestand und (c) den N_{min} -Gehalt der Bodenschicht 0-90 cm.

Es muss hier angemerkt werden, dass die Verzögerung des Pflanzenwachstums keine Folge eines N-Mangels oder der Unsicherheit des Aussaattermins ist. Weder eine Simulation mit zusätzlicher N-Düngung, noch ein früherer Aussaattermin konnten die Phasen starken Biomassezuwachses und damit starker N-Aufnahme mit den gemessenen Werten besser in Übereinstimmung bringen. Vielmehr ist die Verschiebung der Phaseneintrittstermine des Winterweizenbestandes auf die Abbildung des Zusammenhangs zwischen klimatischen Faktoren und die Eintrittstermine in die verschiedenen Wachstumsphasen zurückzuführen, die über Temperatursummen, d.h. mit Hilfe des Konzeptes der biologischen Zeit simuliert werden (siehe SCHRÖDER & SÖNDGERATH, 1995).

4.3.2.3 Konzentrationsverlauf mineralischer Stickstoff

Bodenschicht 0-90 cm

Wie Abbildung 28c zeigt, steigt die gemessene Konzentration für mineralischen Stickstoff (NH_4^+ und NO_3^-) in den obersten 90 cm des Bodens bis Mitte November 1988 auf ein Maximum von 104 kg N ha^{-1} an. Das heißt, es erfolgt eine Netto-N-Mineralisierung, obwohl der Boden in dieser Zeit nur Temperaturen zwischen 0°C und 5°C aufweist. Bis Mitte Juli 1989 sinkt die N_{\min} -Konzentration auf ein Minimum von 14 kg N ha^{-1} , das sie während der Ährenbildung drei Wochen vor dem Erntetermin erreicht (siehe Abbildung 28c). Nach dieser Minimumkonzentration steigt der N_{\min} -Gehalt des Bodens wieder an, erreicht aber nicht das Niveau des Vorjahres zum gleichen Zeitpunkt. Die hohen N_{\min} -Konzentrationen im Herbst 1988 sind schwer zu erklären, da für dieses Jahr, im Gegensatz zum folgenden Herbst 1989, keine organische Düngung berichtet wird, die diese hohen N_{\min} -Werte plausibel erscheinen lassen würde.

Für die Beurteilung der simulierten N_{\min} -Konzentration wird zwischen Herbst/Winter-Periode und der Vegetationsperiode unterschieden, da in letzterer die Simulation des Pflanzenbestandes großen Einfluss auf den Verlauf der N_{\min} -Simulation hat. Wie aus Abbildung 28c und Tabelle 27 deutlich wird, lässt sich die N_{\min} -Konzentration in den obersten 90 cm des Bodens mit SIMULAT-NC gut bis sehr gut nachvollziehen. Die Nitrat- und Ammoniumkonzentration zusammengenommen erreicht mit den Originalparameterwerten aus der Kalibrierung (Simulation 1) eine Modelleffizienz von 0,781 für die Herbst- und Wintermonate. Hier werden die Monate Oktober 1988 bis einschließlich Februar 1989 sowie September bis Oktober 1989 berücksichtigt. Die N_{\min} -Konzentration wird allerdings vor der Vegetationsperiode eher unterschätzt, nach der Ernte und Applikation von Mist dagegen überschätzt. Die Veränderung der Parameter für das Nitrifikations- und Denitrifikationsmodell (Simulation 2) verbessert die Übereinstimmung zwischen berechneten und gemessenen Werten ($ME = 0,864$), auch wenn der steigende Trend der N_{\min} -Werte zu Beginn der Simulationsperiode vom Modell nicht nachvollzogen wird.

Während der Vegetationsperiode (März bis einschließlich August) verschlechtert sich die Modelleffizienz für den Simulationslauf mit dem Originalparametersatz (Simulation 1) auf

einen Wert von 0,410. Die Überschätzung der N_{\min} -Konzentration durch das N-Modell nach der ersten Düngergabe entsteht durch die spät und dann sehr abrupt einsetzende N-Aufnahme des Pflanzenbestandes und ist damit eher als Artefakt anzusehen, das durch die geringe Geschwindigkeit der anfänglichen N-Aufnahme verursacht wird. Obwohl in den folgenden Wochen, d.h. von Ende April bis Anfang Juni, die N-Aufnahme der Pflanze vom Modell unterschätzt wird, weicht die simulierte N_{\min} -Konzentration nicht wesentlich vom Verlauf der gemessenen Werte ab. Dies liegt vor allem daran, dass mit dem in der Bodenmatrix adsorbierten Ammonium NH_4^+ ein Speicher zur Verfügung steht, der zwischen 20 und 40 % des Düngerstickstoffs kurzfristig bindet und sich nur in dem Maße leert, wie der Bodenlösung NH_4^+ entzogen wird (siehe auch Kapitel 4.3.2.7).

In Tabelle 27 sind die Modelleffizienzen noch einmal getrennt für die NO_3^- - und die NH_4^+ -Konzentration aufgeführt. Die fehlende Übereinstimmung zwischen Simulation und gemessenen Werten für die NH_4^+ -Konzentration in den Herbst- und Wintermonaten stammt daher, dass zum Einen die gemessenen Werte sehr niedrig sind ($<1 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$) und zum Anderen im Modell für NH_4^+ eine Grenzkonzentration in Höhe von $1 \text{ kg N ha}^{-1} 10 \text{ cm}^{-1}$ eingeführt wurde, die den nicht mehr mikrobiell verwertbaren, wohl aber einen extrahier- und messbaren Anteil an NH_4^+ im Boden darstellt. Durch diese Grenzkonzentration wird die NH_4^+ -Menge in den Herbst- und Wintermonaten um $5\text{-}10 \text{ kg N ha}^{-1} 90 \text{ cm}^{-1}$ bzw. 100 % und mehr überschätzt. Diese Überschätzung kompensiert wiederum teilweise die Unterschätzung der NO_3^- -Konzentration in diesen Monaten, so dass die Modelleffizienz für die Simulation der als N_{\min} zusammengefasste N-Menge außerhalb der Vegetationsperiode einen hohen Wert erreicht.

Tabelle 27 Modelleffizienz ME für mineralischen Stickstoff N_{\min} in der Bodenschicht 0-90 cm sowie für den Pflanzen-N-Gehalt N_{pfl} (Simulationsperiode 1988/89 am Lehmstandort Neuenkirchen).

| Variable | Modelleffizienz ME | | | |
|----------------------|---------------------------|--------------|--------------------|--------------|
| | Herbst/Winter | | Vegetationsperiode | |
| | Simulation 1 ¹ | Simulation 2 | Simulation 1 | Simulation 2 |
| N_{\min} (0-90 cm) | 0,781 | 0,864 | 0,410 | 0,257 |
| N_{pfl} | - | - | 0,696 | 0,696 |
| NO_3^- (0-90 cm) | 0,441 | 0,810 | 0,225 | -0,060 |
| NH_4^+ (0-90 cm) | -6,949 | -6,945 | 0,240 | 0,241 |

¹ Simulation 1 mit Parametersatz aus der Kalibrierung, Simulation 2 mit geänderten Parameterwerten für das Denitrifikations- und das Nitrifikationsmodell (siehe Text).

Während der Vegetationsperiode tritt keine systematische Überschätzung der NH_4^+ -Konzentration mehr auf, da dem Boden jeweils 75 % des verabreichten Düngers als NH_4^+ zugeführt werden. Die relative Abweichung zwischen gemessenen und simulierten Werten wird durch die höheren Konzentrationen kleiner und die Modelleffizienz für NH_4^+ besser. Allerdings ist die Simulation der NO_3^- -Konzentration während der Vegetationsperiode nicht mehr so gut wie im Herbst/Winter, so dass die Modelleffizienz für den mineralischen Stickstoff

(N_{\min}) insgesamt während der Vegetationsperiode schlechter ausfällt als während der Herbst- und Wintermonate.

Bodenschicht 0-30 cm

Die oberste Bodenschicht von 0-30 cm ist am stärksten den klimatischen Einflüssen, aber auch der landwirtschaftlichen Bearbeitung ausgesetzt. Dieser Schicht wird der Dünger zugeführt, sie ist am stärksten durchwurzelt und in ihr finden, auch durch die mechanische Bodenbearbeitung, wie z.B. das Pflügen, die stärksten Stoffumsätze wie C- und N-Mineralisierung sowie Nitrifikation und Denitrifikation statt. Aus den Umsatzprozessen in dieser Bodenschicht gehen schließlich die Stoffmengen hervor, die mit dem Wasserfluss (und dem Wurzelwachstum) in tiefere Bodenschichten verlagert werden können. Im folgenden Abschnitt wird daher noch einmal die Simulation der NO_3^- - und NH_4^+ -Konzentration in der Bodenschicht 0-30 cm dargestellt.

Wie aus Abbildung 29a und Tabelle 28 deutlich wird, bildet das Modell den Verlauf der NO_3^- -Konzentration in den Herbst- und Wintermonaten hervorragend ab. Die Änderung der Parameter für das Nitrifikations- und das Denitrifikationsmodell (Simulation 2) wirkt sich nur geringfügig aus. Der Simulationsverlauf in dieser Bodenschicht bildet damit eine sehr gute Ausgangsbasis für die Berechnung der Nitratverlagerung in tiefere Bodenschichten, die vor allem in Zeiten ohne Vegetation stattfindet.

Während der Vegetationsperiode wird die Übereinstimmung zwischen gemessenen und simulierten NO_3^- -Konzentrationen geringer, die Modelleffizienz bekommt negative Werte. Dies ist vor allem auf die Verschiebung der pflanzlichen N-Aufnahme zurückzuführen: Von Mitte April bis Mitte Mai wird der simulierte N-Gehalt im Pflanzenbestand stark unterschätzt und vom N-Modell daher überschätzt. Im letzten Maidrittel führt somit der überschätzte N-Entzug der Pflanze zu einer Unterschätzung der simulierten NO_3^- -Konzentration.

Die gemessene NH_4^+ -Konzentration erreicht in den Herbst- und Wintermonaten maximal $3 \text{ kg } \text{NH}_4^+-\text{N ha}^{-1} 30 \text{ cm}^{-1}$ und liegt bei den meisten Messterminen sogar darunter. Diese niedrigen Werte führen dazu, dass das Modell aufgrund der für NH_4^+ festgelegten Grenzkonzentrationen die gemessenen Werte häufig überschätzt. Da diese Überschätzung aber maximal $3 \text{ kg N ha}^{-1} 30 \text{ cm}^{-1}$ erreicht, ist das Simulationsergebnis trotzdem noch als sehr gut zu bezeichnen.

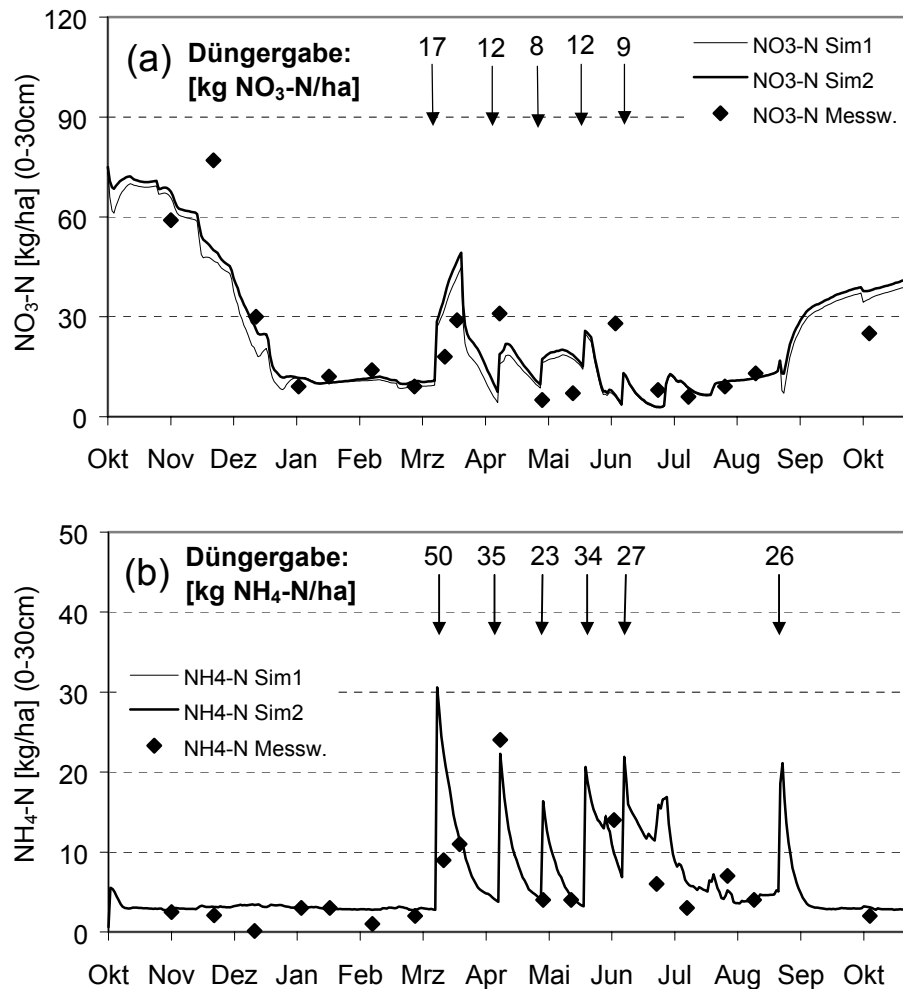


Abbildung 29 Simulierter und gemessener Verlauf der (a) NO₃⁻ - und (b) NH₄⁺-Konzentration in der Bodenschicht 0-30 cm.

Tabelle 28 Modelleffizienz ME für die Nitrat- und Ammoniumkonzentration in der Bodenschicht 0-30 cm (Simulationsperiode 1988/89 am Lehmstandort Neuenkirchen).

| Variable | Modelleffizienz ME | | | |
|--|---------------------------|--------------|--------------------|--------------|
| | Herbst/Winter | | Vegetationsperiode | |
| | Simulation 1 ¹ | Simulation 2 | Simulation 1 | Simulation 2 |
| NO ₃ ⁻ (0-30 cm) | 0,750 | 0,791 | -0,213 | -0,312 |
| NH ₄ ⁺ (0-30 cm) | -0,596 | -0,596 | 0,316 | 0,316 |

¹ Simulation 1 mit Parametersatz aus der Kalibrierung, Simulation 2 mit geänderten Parameterwerten für das Denitrifikations- und das Nitrifikationsmodell (siehe Text).

Die Simulation der NH₄⁺-Konzentration zeigt in der Vegetationsperiode, im Gegensatz zu NO₃⁻ bessere Ergebnisse als während der vegetationslosen Zeit (vgl. Tabelle 28). Nur von Juni bis Anfang Juli wird die NH₄⁺-Konzentration systematisch überschätzt. Dies liegt vor allem daran, dass der simulierte Pflanzenbestand dem Boden während der Ährenbildung weniger Stickstoff entzieht, als es die gemessenen Werte nahe legen. Außerdem führt ein starkes Nie-

derschlagsereignis am 2. Juli im Modell zu einem sprunghaften Anstieg der mikrobiellen Aktivität r . Dies hat eine verstärkte N-Mineralisierung aus der organischen Bodensubstanz zur Folge, die aber von den gemessenen Werten nicht nachvollzogen wird.

Dieses Simulationsergebnis stellt sowohl für die NH_4^+ - und vor allem für die NO_3^- -Konzentration einen hervorragenden Ausgangspunkt für die Simulation der NO_3^- -Verlagerung dar, die im folgenden Kapitel dargestellt wird.

4.3.2.4 NO_3^- -Verlagerung

Die Gefährdung der Grundwasserqualität durch zu hohe Nitratkonzentrationen ist ein Problem, das z.T. durch einen Überschuss an Stickstoffdünger verursacht wird. Ein weiterer Grund ist darin zu sehen, dass in Zeiten starker Mineralisierungstätigkeit, wie z.B. im Frühjahr, auf einer bewirtschafteten Fläche oft kein Pflanzenbewuchs vorhanden ist. Der fehlende N-Entzug durch den Pflanzenbestand bei gleichzeitiger N-Mineralisierung kann ebenfalls dazu führen, dass NO_3^- mit dem Wasserfluss verlagert wird. Dieser Prozess kann, wie im Folgenden gezeigt wird, mit SIMULAT-NC gut abgebildet werden.

Wie in Abbildung 30a zu sehen ist, sind im Laufe der Simulationsperiode drei ausgeprägte Niederschlagsereignisse zu verzeichnen, die potenziell zu einer Nitratauswaschung führen können: Das erste dauert von Mitte November bis Mitte Dezember 1988 und liefert innerhalb eines Monats 110 mm, d.h. etwa 20 % der jährlichen Niederschläge. Bei den zwei anderen Niederschlagsereignissen handelt es sich eher um punktuelle Starkregenereignisse, die während der Vegetationsperiode Ende Juni 32 mm und im letzten Augustdrittel, d.h. nach der Ernte des Winterweizenbestandes, noch einmal 44 mm Niederschlag jeweils an einem Tag liefern.

Als Folge der Niederschlagsereignisse im Laufe des November und Dezember fällt die gemessene Nitratkonzentration in der obersten Bodenschicht stark ab (siehe Abbildung 29a). Ein großer Teil dieses Nitrats findet sich in den Bodenschichten 30-90 cm wieder. So steigen die Messwerte für die NO_3^- -Konzentration in der Schicht 30-60 cm bis Januar um 27 kg ha^{-1} auf ein Maximum von $44 \text{ kg NO}_3^- \text{-N an}$ (Abbildung 30b). Das Modell unterschätzt auch hier, wie schon in den obersten 30 cm des Bodens, die winterlichen Spitzenwerte für die Nitratkonzentration leicht. Das simulierte Maximum liegt bei $37 \text{ kg NO}_3^- \text{-N ha}^{-1} \text{ 30 cm}^{-1}$. Leicht verzögert steigt auch die NO_3^- -Konzentration in der Bodenschicht 60-90 cm kräftig an. Der gemessene Konzentrationsverlauf während der Herbst- und Wintermonate wird durch das Modell sehr gut nachvollzogen (siehe Abbildung 30c).

Ab Mitte März 1989 geht die NO_3^- -Konzentration in den Bodenschichten unterhalb des Pflughorizontes ($> 30 \text{ cm}$) stark zurück. Dieser Konzentrationsrückgang zieht sich durch alle tieferen Bodenschichten. Er ist auf einen zunehmenden N-Entzug durch den Pflanzenbestand zurückzuführen. So beträgt die simulierte Durchwurzelungstiefe Mitte März 70 cm und einen

Monat später, d.h. Mitte April bereits 130 cm (hier nicht abgebildet). In den tieferen Bodenschichten ist daher auch keine nennenswerte Zunahme der Nitratkonzentration zu verzeichnen, wie in Abbildung 30d exemplarisch für die Bodenschicht 170-200 cm gezeigt wird. Auch das spätere Starkregenereignis Mitte Juni hat keine NO_3^- -Verlagerung zur Folge. Erst Ende August führt die Zufuhr von organischem Dünger (Schweinemist) in Kombination mit starken Niederschlägen wieder zu einem leichten Anstieg der gemessenen NO_3^- -Konzentration in der Bodenschicht 30-60 cm, die vom Modell gut nachvollzogen wird. Diese Ergebnisse zeigen, dass das Zusammenwirken der Teilmodelle für Wasser- und Stofftransport, das Pflanzenwachstum sowie die C- und N-Transformationen in SIMULAT die Nitratverlagerung im Boden quantitativ sehr gut nachvollziehen kann.

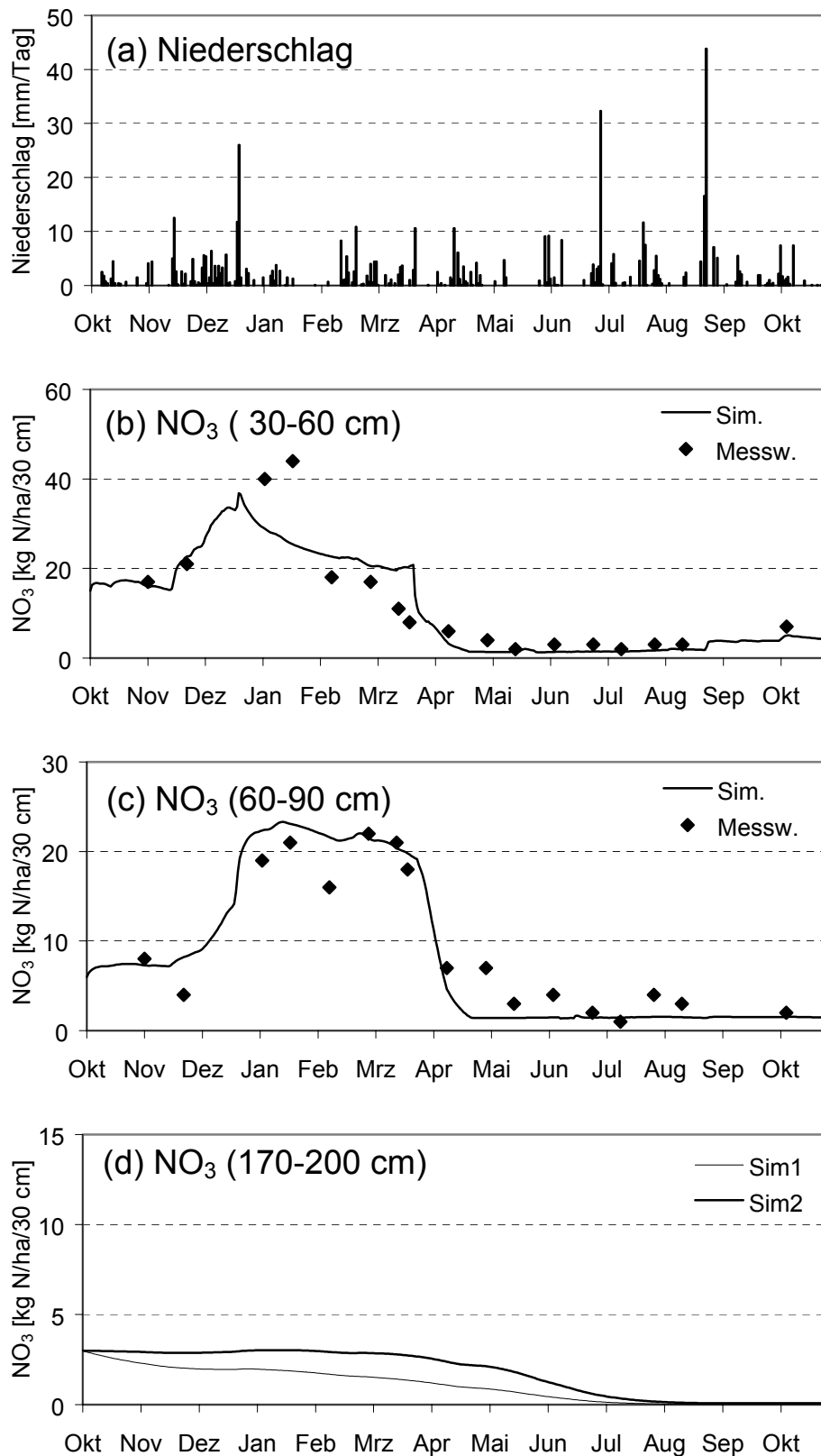


Abbildung 30 Zeitlicher Verlauf (a) der Niederschlagsmengen, (b) der Nitratkonzentration in der Bodenschicht 30-60 cm, (c) der Nitratkonzentration in der Bodenschicht 60-90 cm und (d) der Nitratkonzentration in der Bodenschicht 170-200 cm.

4.3.2.5 Die mikrobielle Biomasse und ihre Aktivität

Die Simulation der mikrobiellen Biomasse, ihrer wechselnden Aktivität und Stoffdurchsätze spielen in SIMULAT-NC eine zentrale Rolle. Die mikrobielle Aktivität r wird im Modell über die Konzentration an löslichem Kohlenstoff C_s , mineralischem Stickstoff (NH_4^+ und NO_3^-) sowie über die Bodentemperatur und den Bodenwassergehalt gesteuert. Im Labormaßstab sind die Verfügbarkeit von C- und N-Substrat die limitierenden Steuergrößen für die mikrobielle Aktivität, da die Temperatur und der Wassergehalt des Bodens in der Regel auf nahezu optimalem Niveau konstant gehalten werden. Dies ändert sich unter den wechselnden Klimabedingungen eines Freilandexperimentes. Im folgenden Abschnitt wird daher der unter Freilandbedingungen über ein Jahr simulierte Verlauf der Modellvariablen analysiert, die für die Steuerfunktionen ausschlaggebend sind, sowie ihr Einfluss auf die mikrobielle Aktivität erfasst. Der Verlauf der Simulation der Witterungsbedingungen wurde bereits in Kapitel 4.3.2.1 sowie in Abbildung 27 analysiert. Im folgenden Abschnitt wird daher vor allem der Verlauf der mikrobiellen C- und N-Substratkonzentrationen und ihr Einfluss auf die mikrobielle Biomasse (C_b und N_b) und ihre Aktivität beschrieben.

Als Hauptquelle für die mikrobiell verwertbare organische Substanz C_s dient in SIMULAT-NC der Pflanzenbestand. Während der Vegetationsperiode stellen die Wurzeln des Winterweizenbestandes durch Wurzelausscheidungen und absterbende Wurzelbiomasse eine kontinuierliche Quelle für den löslichen organischen Kohlenstoffpool C_s dar. Im Herbst und Winter bleibt der über das Pflanzenmodell simulierte C-Eintrag mit einer Rate um $1 \text{ kg C ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$ gering (siehe Abbildung 31a). Ab März beginnt der simulierte tägliche C_s -Eintrag jedoch zu steigen und erreicht im Mai, mit dem stärksten Biomassezuwachs beim Pflanzenbestand einhergehend, ein Maximum von bis zu $8 \text{ kg C ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$. Diese C-Zufuhr erfolgt über die Gesamtheit der Wurzelbiomasse, d.h. in jeder Bodenschicht jeweils proportional zur Durchwurzelungsdichte in dieser Schicht. So befinden sich im Mai 47 % der Wurzelbiomasse in der Bodenschicht 0-30 cm und es erfolgt eine tägliche Zufuhr von $3,8 \text{ kg C}_s \text{ ha}^{-1} \text{ 30 cm}^{-1}$. Über die gesamte Simulationsperiode beläuft sich die Zufuhr an organischer Substanz aus dem lebenden Bestand auf $1000 \text{ kg C ha}^{-1}$. Diese Menge liegt damit im oberen Bereich der von SWINNEN et al. (1995) angegebenen Menge von $450\text{-}990 \text{ kg C ha}^{-1} \text{ Jahr}^{-1}$. Nach MARTIN & MERCKX (1992) können Weizenpflanzen zwischen Schossen und Ährenschieben allerdings bis zu $1500 \text{ kg C ha}^{-1}$ über die Wurzeln in den Boden abgeben. Damit bewegen sich die im SIMULAT-Pflanzenmodell über die Pflanzenwurzeln zugeführten Mengen organischen Substrates in einer plausiblen Größenordnung.

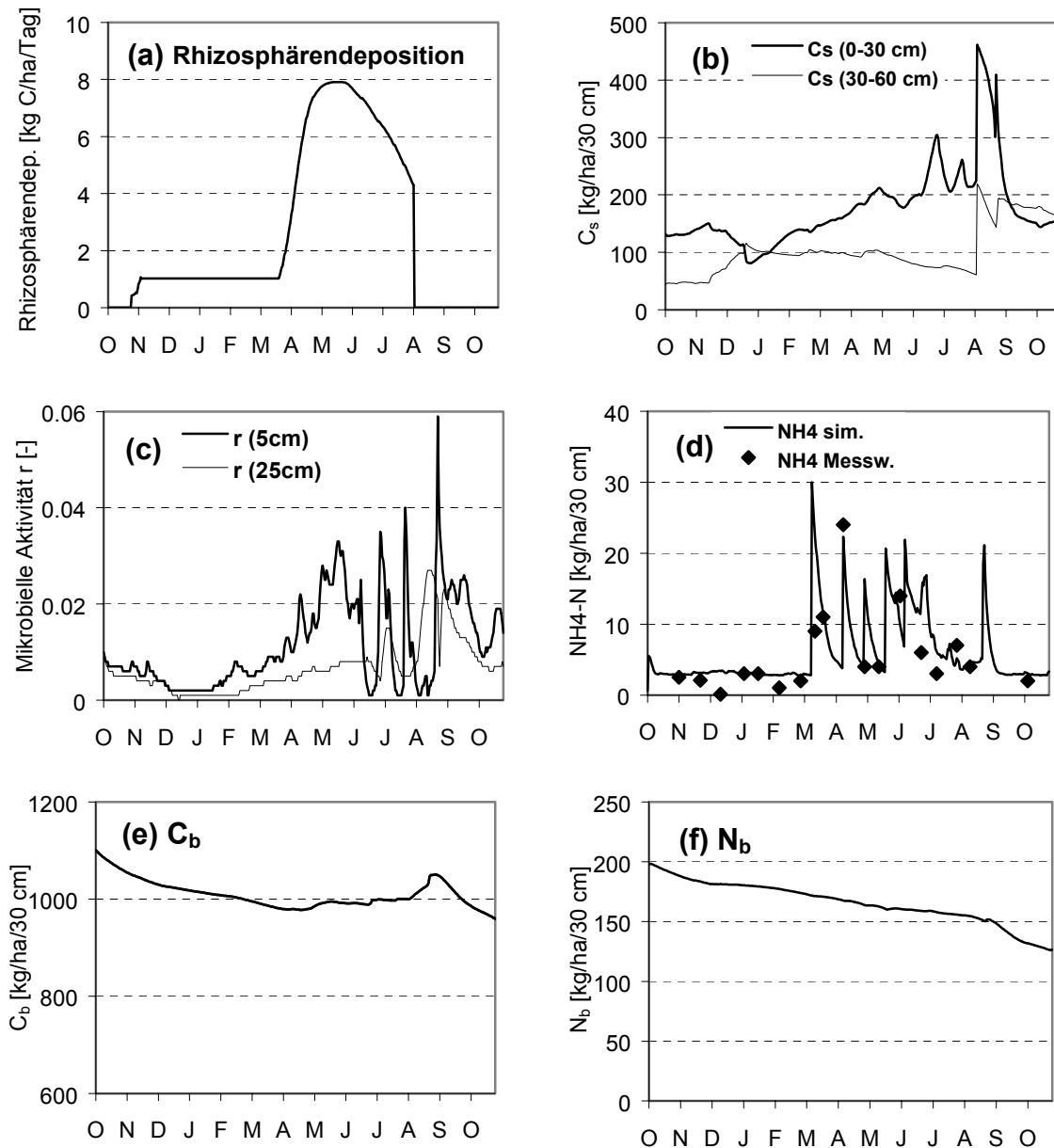


Abbildung 31 Simulierter Verlauf (a) des Eintrags an organischer Substanz über die Pflanzenwurzeln in den Boden (Rhizosphärendeposition), (b) der Konzentration an löslichem organischen Kohlenstoff C_s , (c) der mikrobiellen Aktivität r in den Bodenschichten 0-10 cm und 20-30 cm, (d) der NH_4^+ -Konzentration in der Bodenschicht 0-30 cm, (e) der Konzentration an mikrobiellem Kohlenstoff C_b und (f) der Konzentration an mikrobiellem Stickstoff N_b .

Die aus dem Abbau der organischen Substanz und der Zufuhr über die Pflanzenwurzeln resultierende Konzentration an löslichem organischen Kohlenstoff C_s bleibt in der Bodenschicht 0-30 cm bis Anfang Dezember auf dem Niveau der Anfangswerte (Abbildung 31b). Als Folge starker Niederschläge durchläuft die C_s -Konzentration Mitte Dezember ein Minimum; der wasserlösliche organische Kohlenstoff wird gemeinsam mit Nitrat (siehe Abbildung 30b und c) in tiefere Bodenschichten verlagert und steht der mikrobiellen Biomasse in diesen Bodenschichten als zusätzliches Substrat zur Verfügung. Die mikrobielle Aktivität ist in dieser Zeit sehr gering (Abbildung 31c), da die mittleren Tagestemperaturen in der obersten Boden-

schicht Minusgrade erreichen und auch in der Schicht 20-30 cm meistens unter 5°C bleiben (siehe Abbildung 27b).

Von Anfang Februar bis Mai steigt die C_s -Konzentration in der Schicht 0-30 cm nahezu kontinuierlich an. Diese Netto-Zunahme ist sowohl eine Folge der ab März verstärkten C_s -Zufuhr über die Wurzeln des Pflanzenbestandes, resultiert aber ebenso aus dem zunehmenden Abbau der organischen Bodensubstanz. Das heißt, durch den Anstieg der mikrobiellen Aktivität kommt es zu einem positiven „Priming Effect“. So werden zwischen Anfang Februar und Mitte Mai $780 \text{ kg CO}_2\text{-C ha}^{-1} 30 \text{ cm}^{-1}$ emittiert (hier nicht abgebildet) und für den humosen C-Pool C_h wird eine Netto-Abnahme um $80 \text{ kg C ha}^{-1} 30 \text{ cm}^{-1}$ berechnet. Im gleichen Zeitraum werden der Bodenschicht 0-30 cm etwa $185 \text{ kg C}_s \text{ ha}^{-1}$ über die Wurzeln zugeführt.

Im Mai erfolgen zwei N-Düngergaben, die zusammen mit der Zufuhr an löslichem organischen Kohlenstoff zu einer so starken Zunahme der mikrobiellen Aktivität führen (Abbildung 31c), dass auch die Konzentration an mikrobielle Biomasse C_b ansteigt (Abbildung 31e). Als Folge wird der lösliche organische Kohlenstoff stärker verbraucht als nachgeliefert und auch der Düngerstickstoff wird sowohl über die Pflanze, als auch die mikrobielle Biomasse extrem schnell immobilisiert. Dies führt zu einer sehr guten Übereinstimmung zwischen gemessener und simulierter NH_4^+ -Konzentration im Mai (Abbildung 31d). Die mikrobielle Aktivität r in der Bodenschicht 0-10 cm steigt zwar mit zunehmender C-Zufuhr über die Wurzeln, reagiert aber deutlich auf die N_{\min} -Düngergaben in den Monaten April und Mai (siehe Abbildung 31c). In der obersten, am stärksten durchwurzelter Bodenschicht wirkt damit Stickstoff als limitierender Faktor. Die starke Durchwurzelung, die einer Ausdehnung der Rhizosphäre gleichkommt, gewährleistet über die Wurzelausscheidungen eine ausreichende Versorgung der Mikroorganismenpopulation mit C-Substrat. Dies entspricht experimentellen Ergebnissen von CHENG et al. (1996), der im Bereich der Rhizosphäre keine C-Limitierung, sondern eher eine Limitierung durch andere Nährstoffe feststellen konnte. Dies ist ein Hinweis darauf, dass die weit verbreitete Ansicht, landwirtschaftliche Böden in Deutschland seien im Hinblick auf die mikrobielle Wachstumsdynamik eher C- als N-limitiert, nur mit Einschränkungen gültig ist.

Zwischen Juni und August gibt es drei Phasen extremer Trockenheit (siehe Abbildung 27a), die die mikrobielle Aktivität in der Bodenschicht 0-10 cm auf nahe null zurückfallen lassen und dazu führen, dass sowohl die mikrobielle NH_4^+ -Aufnahme als auch die Verwertung von C_s rapide zurückgeht. Da diese Trockenperioden immer wieder von Niederschlagsereignissen unterbrochen werden, erfolgt zwischenzeitlich auch immer wieder ein Anstieg der mikrobiellen Aktivität r , der eine stärkere Akkumulation von löslichem organischen Material C_s verhindert.

Die Ernte des Weizenbestandes Anfang August fällt in eine Phase extremer Trockenheit, so dass die Substratzufuhr über die im Boden verbleibende Wurzelbiomasse in den tieferen (und feuchteren) Bodenschichten zu einer höheren mikrobiellen Aktivität führt als in der obersten

Schicht. Das Pflanzenmodell simuliert zum Zeitpunkt der Ernte eine Wurzelbiomasse von 2216 kg ha^{-1} (entsprechend 11 % der Gesamtbiomasse). Nimmt man für diese einen C-Gehalt von 45 % an, so werden dem Boden mit der Ernte über die gesamte Durchwurzelungstiefe 997 kg organischer Kohlenstoff zugeführt. Zum Zeitpunkt der Ernte befinden sich 49 % der Wurzelbiomasse in der Bodenschicht 0-30 cm, d.h. dieser Bodenschicht fließen 488 kg organischer Kohlenstoff zu. Diese Menge bewegt sich in der von SWINNEN et al. (1995) berichteten Größenordnung, wonach dem Boden nach der Ernte über die Wurzelbiomasse zwischen 330 und 370 kg C ha^{-1} zugeführt werden. Auch die Gesamtmenge an organischem Kohlenstoff, die dem Boden über das Wurzelsystem (Exsudate + Wurzelbiomasse nach der Ernte) über das Jahr zugeführt werden, liegt mit 26 % der oberirdischen Biomasse zum Zeitpunkt der Ernte, nahe dem in der Literatur angegebenen Wert von 30 % (vgl. z.B. JENSEN, 1993; XU & JUMA, 1994). Die organischen C-Flüsse zwischen Pflanzenbestand und Boden lassen sich somit unter den gegebenen Bedingungen mit SIMULAT plausibel abbilden.

Einer Zufuhr an organischem Dünger (Schweinemist) Ende August folgt ein kräftiges Niederschlagsereignis, das zumindest kurzfristig anaerobe Zustände hervorruft. Die mikrobielle Aktivität r erreicht mit dieser Düngergabe ihr Maximum von 0,06, fällt dann aber aufgrund des hohen Wassergehaltes, der gleichbedeutend mit einem anaeroben Zustand des Bodens ist, schnell wieder ab. Wie Abbildung 31e zeigt, weist die mikrobielle Biomasse als Folge der kombinierten Zufuhr von Stickstoff und verwertbarem organischen Substrat im August kräftiges Wachstum auf. Diesem Zuwachs folgt aber ein schnelles Absterben, da die mikrobielle Aktivität r im Oktober trotz der geringen Konzentration an löslichem C- und N-Substrat relativ hoch ist. Dies ist auf einen Temperaturanstieg im Oktober zurückzuführen, der mit einem kräftigen Niederschlagsereignis einhergeht (siehe Abbildung 27).

Der mikrobielle Wachstumsschub im August ist allerdings nur auf den C-Anteil beschränkt. Die Konzentration an mikrobiell gebundenem Stickstoff nimmt nahezu kontinuierlich ab (siehe Abbildung 31f) und das mikrobielle C/N-Verhältnis steigt von 5,5 zu Beginn der Simulationsperiode auf 7,6. Dieser Wert liegt durchaus im Bereich des Beobachtbaren, die Gesamtrendenz ist aber eher unbefriedigend. Es sind zwei Modellannahmen für diesen Trend verantwortlich. Zum Einen erfolgt die mikrobielle N-Aufnahme im Modell hauptsächlich über NH_4^+ . Dieses steht im betrachteten Boden aber nur zu Düngeterminen in größeren Mengen zur Verfügung und die Mikroorganismen müssen zeitgleich mit dem Pflanzenbestand um den Stickstoff konkurrieren. Ein weiterer Grund ist der, dass sich die N-Immobilisierung der Mikroorganismenpopulation verlangsamt je näher das aktuelle C/N-Verhältnis dem minimalen C/N-Verhältnis liegt. Dies führte schon bei der Simulation der Laborversuche im letzten Kapitel häufig zu einer Unterschätzung der mikrobiellen N-Aufnahme, wenn das anfängliche C/N-Verhältnis der Mikroorganismenpopulation so eng gewählt wurde, wie es am Untersuchungsstandort Neuenkirchen gemessen wurde. Diese beiden Faktoren zusammengenommen führen zu einem Netto-Rückgang der Konzentration an mikrobiellem Stickstoff N_b .

Die hier präsentierten Ergebnisse zeigen, dass über ein Jahr betrachtet, bei der Limitierung

der mikrobiellen Aktivität r die Witterungsbedingungen eine mindestens ebenso wichtige Rolle spielen können, wie die Substratverfügbarkeit. Vor allem in den Wintermonaten kann eine temperaturbedingte Einschränkung der mikrobiellen Aktivität erfolgen, während die Aktivität in den Sommermonaten eher durch die mangelnde Wasserverfügbarkeit eingeschränkt wird.

4.3.2.6 N_2O -Emissionen/Denitrifikation

Im folgenden Kapitel werden Simulationsergebnisse für die gasförmigen N-Emissionen im Zeitraum Oktober 1988 bis Oktober 1989 am Standort Neuenkirchen vorgestellt. Wie aus Abbildung 32a deutlich wird, erreichen die simulierten N_2O -Emissionen Raten zwischen $0,7 \text{ g } N_2O\text{-N ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$ Ende Juli 1989 als Minimum bei extrem niedrigem Bodenwassergehalt und 925 g als Maximumwert. Es handelt sich bei diesem Wert um ein sehr kurzfristiges Ereignis, die Emissionsrate fällt schon einen Tag später auf $140 \text{ g N ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$ ab. Die maximale Emissionsrate wird einen Tag nach der Zufuhr von $20 \text{ t Schweinemist ha}^{-1}$ simuliert und ist eine Folge der Zufuhr hoher N-Mengen, ausreichender Versorgung mit löslichem organischen C (C_s) kombiniert mit dem stärksten Niederschlagsereignis des Jahres (43 mm Tag^{-1}).

Die mittlere Emissionsrate beträgt $28 \text{ g } N_2O\text{-N ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$, so dass über ein Jahr (1.10.88 bis 30.9.89) N_2O -Emissionen in der Höhe von $10,3 \text{ kg } N_2O\text{-N ha}^{-1}$ berechnet werden. Bezogen auf den Dünger-N-Eintrag sind dies $4,5 \%$ des AHL-Düngers bzw. $2,8 \%$ der Gesamtmenge an N-Dünger (AHL + N aus Wirtschaftsdünger). Diesen Emissionswerten liegt die N_2O -Entwicklung in der Bodenschicht 0-30 cm zugrunde. Es wurden nicht nur die obersten 10 cm des Bodens berücksichtigt, da im November und Dezember sowohl NO_3^- als auch lösliches organisches Material in tiefere Bodenschichten ausgewaschen werden, was zur Folge hat, dass sich die Hauptdenitrifikationsaktivität in die Bodenschichten 10-30 cm verlagert (hier nicht abgebildet).

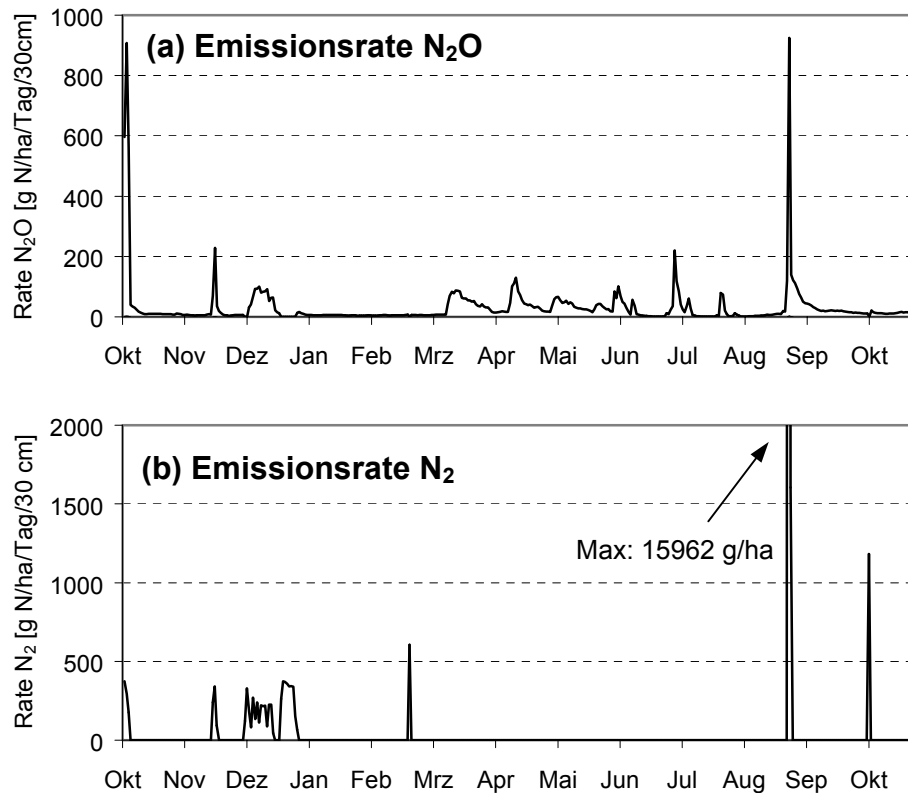


Abbildung 32 Simulationsergebnisse für (a) die Rate der N_2O -Emissionen und (b) die Rate der N_2 -Emissionen aus der Bodenschicht 0-30 cm.

Leider standen für den simulierte Zeitraum keine gemessenen N_2O -Emissionen zur Verfügung. In der Literatur angegebene Messwerte für N_2O -Emissionen, die als Vergleich verwendbar wären, variieren stark. So liegen die von KÖBRICH (1995) auf dem gleichen Standort unter Winterweizen gemessenen maximalen Emissionsraten mit $15 \text{ g N}_2\text{O-N ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$ sehr viel niedriger als die simulierten Emissionsspitzen. Auch die durchschnittliche gemessene Rate von $5,7 \text{ g N}_2\text{O-N ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$ wird von den simulierten Werten um den Faktor 5 überschritten. Allerdings wurden diese Werte in einem anderen Jahr, d.h. unter anderen Witterungsbedingungen gemessen und die Messperiode von KÖBRICH (1995) umfasste nur die Monate Januar bis Oktober. So kann es sein, dass die häufig in den Wintermonaten beobachteten Emissionsspitzen nicht erfasst wurden. ERNST (1996) fand für diesen Untersuchungsstandort in den Jahren 1995/96 bei ganzjährigen Messungen mit $113 \text{ g N}_2\text{O-N ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$ fast um den Faktor 10 höhere Emissionsspitzen als die von KÖBRICH gemessenen Werte. Die gesamten N_2O -Emissionen beliefen sich relativ zur Düngermenge auf 1,8 % des als AHL ausgebrachten Dünger-N ($3,8 \text{ kg N}_2\text{O-N ha}^{-1}$, Jahr 1995) aus einem Winterweizenbestand.

FLESSA et al. (1995) (wie zitiert in FROLKING et al., 1998) finden dagegen bei einer Messkampagne auf Ackerland in Deutschland sogar Emissionsspitzen von bis zu $650 \text{ g N}_2\text{O-N ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$, d.h. maximale Emissionsraten in einer ähnlichen Größenordnung wie die von SIMULAT-NC berechneten Werte. Von CLAYTON et al. (1997) wurden im Sommer Emissionsspitzen von bis zu $593 \text{ g N}_2\text{O-N ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$ nach einer Calciumnitrat-Düngung auf Grasland

gemessen. Die durchschnittlichen Emissionsraten ähneln bei FLESSA et al. mit $38\text{--}69 \text{ g N}_2\text{O-N ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$ und bei CLAYTON et al. mit $31\text{--}36 \text{ g N}_2\text{O-N ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$ den simulierten Werten. Folglich liegen auch die von FLESSA et al. gemessenen jährlichen Emissionen von $9,4\text{--}16,8 \text{ kg N}_2\text{O-N ha}^{-1} \text{ Jahr}^{-1}$ unter verschiedenen Feldfrüchten vergleichbar hoch wie die simulierten Werte, obwohl die ausgebrachten Düngermengen mit $50\text{--}160 \text{ kg N ha}^{-1} \text{ Jahr}^{-1}$ zuzüglich Wirtschaftsdünger eher niedriger liegen.

Diese Spanne der in der Literatur gefundenen Messwerte von N_2O -Emissionen macht deutlich, mit welchen Unsicherheiten auch die gemessenen N_2O -Emissionen behaftet sein können. Die von SIMULAT-NC simulierten Werte liegen sicherlich an der oberen Grenze der in der Realität aus dem Boden freigesetzten N_2O -Mengen, oder überschätzt sie sogar. Auf eine weitere Anpassung der Parameter wird aber aufgrund fehlender Messwerte verzichtet. Es wäre allerdings notwendig, den hier präsentierten Modellansatz mit geeigneten unter Freilandbedingungen gemessenen Werten zu validieren, da die N_2O -Emissionen, je nach Witterungsbedingungen und Bewirtschaftungspraxis beträchtlich sein können.

Einen weiteren Beitrag zu den gasförmigen N-Verlusten aus dem Boden leisten die N_2 -Emissionen. Da N_2 ein Reduktionsprodukt aus N_2O ist, wird durch seine Bildung die Freisetzung des Klimagases N_2O vermindert. Die stärksten länger andauernden N_2 -Emissionen, die in SIMULAT-NC ausschließlich aus der heterotrophen Denitrifikation stammen, werden für die Monate November und Dezember 1988 simuliert (siehe Abbildung 32b). Während dieser Monate werden durch eine längere Niederschlagsperiode hohe Bodenwassergehalte verursacht, die in Kombination mit einer hohen Nitratkonzentration Emissionsraten bis zu $374 \text{ kg N ha}^{-1} \text{ Tag}^{-1}$ verursachen. Eine weitere Emissionsspitze wird für Ende August 1989 aufgrund einer Zufuhr von Schweinemist simuliert, da die hohe N-Zufuhr mit starken Niederschlägen einhergeht. Für den Zeitraum eines Jahres (1.10.88 bis 30.9.89) berechnet SIMULAT-NC Emissionen von insgesamt $25,0 \text{ kg N}_2\text{-N ha}^{-1} \text{ Jahr}^{-1}$. Damit liegen die N_2 -Emissionen um den Faktor 2,4 höher als die simulierten N_2O -Emissionen. Dies entspricht Aussagen von z.B. MAHIMAIRAJA et al. (1995), wonach in Böden in der Regel N_2 als dominierendes Denitrifikationsprodukt beobachtet wird. Der N_2O -Anteil an den gasförmigen N-Verlusten beträgt 29 % und liegt damit in der von RYDEN et al. (1979) angegebenen Spanne von 20 bis 38 %. Auch wenn die Gesamtmenge der gasförmigen N-Verluste vom Modell unter Umständen überschätzt wird, so ist SIMULAT-NC doch in der Lage, das Verhältnis von N_2O zu N_2 -Emissionen in einer durchaus realistischen Größenordnung abzubilden.

4.3.2.7 Adsorption und Desorption von Ammonium

Bei dem Boden des Untersuchungsstandortes Neuenkirchen handelt es sich um einen Lößboden, in dessen A_p -Horizont nach NIEDER et al. (1996) im Jahr 1991 zwischen 520 und $760 \text{ kg NH}_4\text{-N ha}^{-1} \text{ 30 cm}^{-1}$ „nicht-austauschbar“ gebunden sind (diese Werte beziehen sich allerdings nicht auf den hier simulierten Schlag). Nach HAAS et al. (1993) ist frisch, d.h. nach Düngerezufuhr adsorbiertes Ammonium weniger stark in der Bodenmatrix gebunden als nativ

fixiertes Ammonium, so dass ein Teil für Pflanzen und Mikroorganismen des Bodens verfügbar ist. Es ist also davon auszugehen, dass der hier simulierte Boden eine gewisse Kapazität für eine reversible NH_4^+ -Sorption hat.

Wie Abbildung 33a zeigt, führen die fünf Düngergaben bei der Simulation der adsorbierten NH_4^+ -Menge, jeweils zu einem schnellen Anstieg der NH_{4s} -Konzentration. So finden sich zwei Tage nach dem Düngetermin jeweils zwischen 20 und 29 % des ausgebrachten Düngerstickstoffes in diesem Pool und im Juni werden Konzentrationen von bis zu $24 \text{ kg NH}_{4s}\text{-N ha}^{-1} 30 \text{ cm}^{-1}$ erreicht. Die Höhe und das Andauern dieser höheren Konzentration an sorbiertem Ammonium wird dadurch verursacht, dass im Juni eine letzte N-Düngung erfolgt (36 kg ha^{-1}), der Pflanzenbestand aber in den folgenden zwei Wochen dem Boden nur sehr wenig N entzieht. Erst mit Einsetzen des Ährenschiebens erfolgt noch einmal eine stärkere N-Aufnahme durch die Pflanzen. Dieser pflanzliche N-Entzug führt dazu, dass dem NH_{4s} -Pool innerhalb von sechs Tagen etwa 15 kg N ha^{-1} entzogen werden. Bei den vier Düngeterminen vorher wird das NH_{4s} langsamer, d.h. innerhalb von zwei bis vier Wochen wieder in die Bodenlösung überführt, d.h. desorbiert. Dieser Prozess verläuft damit sehr viel langsamer als der Fixierungsprozess.

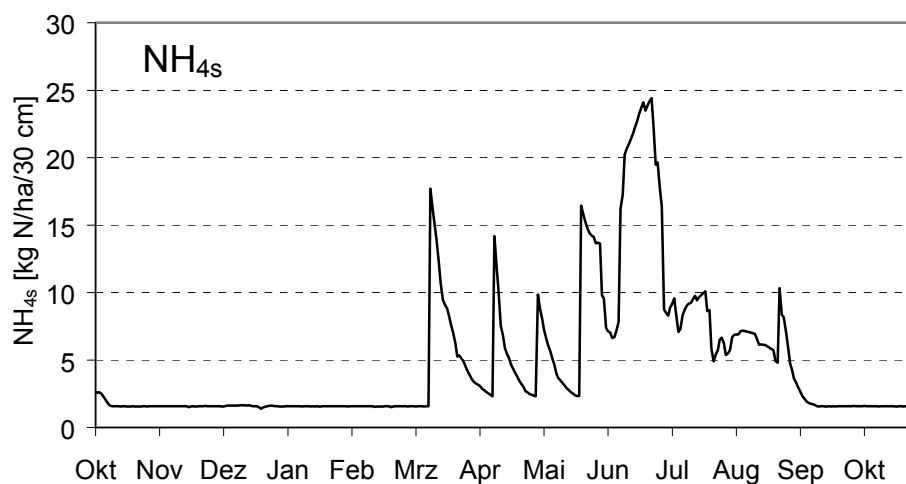


Abbildung 33 Simulierter Konzentrationsverlauf für sorbiertes Ammonium (NH_{4s}) in der Bodenschicht 0-30 cm.

Die für den Juli und August simulierten kleineren NH_{4s} -Konzentrationsspitzen sind auf zunehmende N-Mineralisierung im Juli sowie auf die Zufuhr des NH_4^+ -haltigen organischen Düngers Ende August zurückzuführen. Im September und Oktober lässt starke Nitrifikationsstätigkeit durch relativ hohe Temperaturen und einen nahezu optimalen Bodenwassergehalt die NH_4^+ -Konzentration in der Bodenlösung stark absinken. Dies führt dazu, dass sich auch der Speicher für das fixierte Ammonium leert.

4.3.2.8 Mikrobielle N-Verwertung oder N-Fixierung?

Eine der Hypothesen bei der Entwicklung von SIMULAT-NC bestand darin, dass das während der Vegetationsperiode häufig beobachtete schnelle Absinken der N_{\min} -Konzentration bzw. die geringe Wiederfindungsrate für den Düngerstickstoff durch eine mikrobielle N-Immobilisierung erklärt werden kann. Da weder für das in der Bodenmatrix sorbierte N (NH_4s), noch für das in der mikrobiellen Biomasse festgelegte N (N_b) gemessene Werte vorliegen, werfen die Ergebnisse des letzten Abschnittes die Frage auf, ob die NH_4 -Sorptions wirklich die Rolle spielt, wie es hier den Anschein hat, oder ob die mikrobielle Immobilisierung unterschätzt wird. Die mikrobielle N-Konzentration nimmt während der Simulationsperiode kontinuierlich ab, was nicht den Beobachtungen von HARDEN (1998), oder NIEDER et al. (1996) für diesen Untersuchungsstandort entspricht. NIEDER et al. (1996a) stellten zwischen März und Juni 1991 vielmehr einen Anstieg des mikrobiell gebundenen Stickstoffes um $80 \text{ kg N ha}^{-1} 30 \text{ cm}^{-1}$ fest. Allerdings konnten sie keinen Unterschied bei der mikrobiellen N-Konzentration in einer konventionell und einer ungedüngten Versuchsvariante feststellen. Dies kann als ein Hinweis darauf gedeutet werden, dass im untersuchten Boden ausreichend mikrobiell- und pflanzenverfügbares N gespeichert ist.

Um der Frage nach dem relativen Beitrag von mikrobieller N-Immobilisierung und NH_4^+ -Sorptions trotz fehlender Messwerten nachzugehen, wird in einem Simulationsexperiment untersucht, in welchem Ausmaß eine veränderte N-Aufnahmerate der mikrobiellen Biomasse bzw. eine Änderung des Sorptionskoeffizienten k_c die Übereinstimmung zwischen simulierter und gemessener N_{\min} -Konzentration beeinflusst. Wie schon bei der Validierung des Modells mit Hilfe von Laborexperimenten wird die mikrobielle Immobilisierungsrate für NH_4^+ ($\mu NH4_{max}$) um den Faktor 10 variiert. Diese Spanne von Immobilisierungsraten war sehr gut geeignet, um das gemessene Mineralisierungs- und Immobilisierungsverhalten unterschiedlicher Böden nachzuvollziehen. Die NH_4^+ -Sorptions wird lediglich aktiviert ($k_c = 0,12$) bzw. inaktiviert ($k_c = 0$).

Es werden drei Fälle untersucht:

1. Die mikrobielle Immobilisierungsrate für NH_4^+ ($\mu NH4_{max}$) wird von 1,1 auf $5,3 \text{ Tag}^{-1}$ erhöht (Ih), der Sorptionskoeffizient k_c bleibt unverändert (Sh) (Fall IhSh);
2. die mikrobielle Immobilisierungsrate für NH_4^+ ($\mu NH4_{max}$) wird von 1,1 auf $5,3 \text{ Tag}^{-1}$ erhöht (Ih), der Sorptionskoeffizient k_c wird auf null gesetzt (Sl) (Fall IhSl) und
3. die mikrobielle Immobilisierungsrate für NH_4^+ ($\mu NH4_{max}$) wird von 1,1 auf $0,5 \text{ Tag}^{-1}$ abgesenkt (Il), der Sorptionskoeffizient k_c bleibt unverändert (Sh) (Fall IlSh).

Wie in Abbildung 34a zu sehen ist, hat die Variation der mikrobiellen Immobilisierungsrate nur einen geringen Einfluss auf den Verlauf der N_{\min} -Konzentration. Die Simulation mit der höchsten Immobilisierungsrate (Fall IhSh) weist nur um maximal $2,7 \text{ kg N ha}^{-1} 30 \text{ cm}^{-1}$ geringere N_{\min} -Konzentrationen auf als die Standardsimulation. Auch die Verhinderung der NH_4^+ -Sorptions bei gleichzeitig beschleunigter N-Immobilisierung durch die Mikroorganismen (Fall

IhSl), führt zwar zu einer stärkeren mikrobiellen N-Aufnahme als mit den Standardparametern; trotzdem wird die N_{\min} -Konzentration vom Modell kräftig überschätzt.

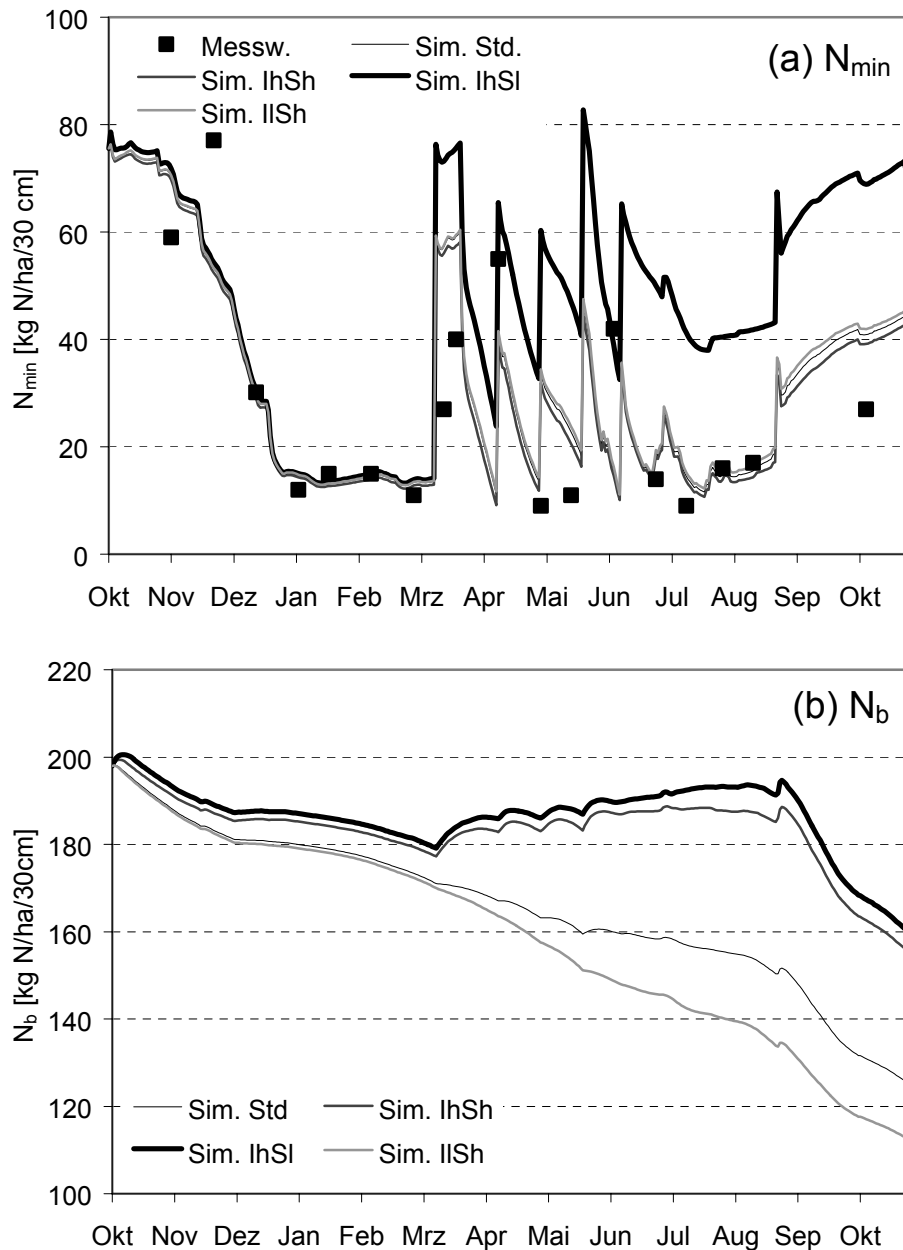


Abbildung 34 Verlauf der gemessenen und simulierten N_{\min} -Konzentration (a), Verlauf der simulierten Konzentration für den mikrobiellen Stickstoff N_b (b) bei Variation der mikrobiellen Immobilisierungsrate und dem Sorptionskoeffizienten für NH_4^+ (**Standard**: $\mu NH_{4_{\max}} = 1,1 \text{ Tag}^{-1}$, $k_c = 0,12$; **IhSh**: $\mu NH_{4_{\max}} = 5,3 \text{ Tag}^{-1}$, $k_c = 0,12$; **IhSl**: $\mu NH_{4_{\max}} = 5,3 \text{ Tag}^{-1}$, $k_c = 0,0$; **IISh**: $\mu NH_{4_{\max}} = 0,5 \text{ Tag}^{-1}$, $k_c = 0,12$).

Wie aus den Kurvenverläufen für die Fälle IhSh und IhSl in Abbildung 34b deutlich wird, führt eine Erhöhung der mikrobiellen Immobilisierungsrate $\mu NH_{4_{\max}}$ dazu, dass der Konzentrationsverlauf des simulierten mikrobiellen N eher der von HARDEN (1995) berichteten zunehmenden Tendenz der N_b -Konzentration entspricht. Mit Beginn der Stickstoffdüngung Anfang März beginnt die Konzentration an mikrobiellem N leicht anzusteigen. Die durch die

Verhinderung der NH_4^+ -Sorption höhere N_{\min} -Konzentration führt auch zu einem leicht stärkeren Anstieg des mikrobiellen N. Eine Verminderung der mikrobiellen N-Aufnahmerate (Fall IIsh) führt dagegen zu einem stärkeren Absinken der N_b -Konzentration. Dies ist allerdings erst mit Beginn der Düngeperiode im März der Fall, d.h. wenn die NH_4^+ -Konzentrationen im Boden ansteigen. Die hohen N_{\min} -Werte im Winter sind auf hohe NO_3^- -Konzentrationen zurückzuführen und haben durch die niedrige mikrobielle Immobilisierungsrate für NO_3^- nur einen geringen Einfluss auf die mikrobielle N-Konzentration.

In Bezug auf den relativen Einfluss von mikrobieller N-Immobilisierung und NH_4^+ -Sorption auf den Verlauf der mineralischen N-Konzentration im Boden lässt sich feststellen, dass

1. der Verlauf der N_{\min} -Konzentration nicht sensitiv auf eine Erhöhung der mikrobiellen Immobilisierungsrate für NH_4^+ reagiert, der Verlauf der mikrobiellen N-Konzentration N_b jedoch sehr wohl beeinflusst wird; und
2. eine Nichtberücksichtigung des Prozesses der NH_4^+ -Sorption zu einer starken Überschätzung der N_{\min} -Konzentration führt, die auch durch eine Verstärkung der mikrobiellen Immobilisierung nicht auszugleichen ist.

Diese Ergebnisse sind ein deutlicher Hinweis darauf, dass während der Vegetationsperiode im vorliegenden Boden die NH_4^+ -Sorption an der Bodenmatrix eine wichtigere Rolle spielt als die mikrobielle N-Immobilisierung.

4.3.2.9 Sensitivitätsanalyse

Es wurde eine Sensitivitätsanalyse mit dem Ziel durchgeführt, den relativen Einfluss der einzelnen Modellparameter auf die N_{\min} -Konzentration zu untersuchen. Für Standard- N_{\min} -Konzentrationen wurden zwei Zeitpunkte im Jahr ausgewählt, an denen Entscheidungen über eine N-Zufuhr zum Boden getroffen werden müssten. Dies ist Ende Februar, d.h. vor dem ersten Düngetermin der Fall sowie Mitte August nach der Ernte, wenn über die Ausbringung von Wirtschaftsdünger wie z.B. Gülle oder Mist entschieden wird. Außerdem wurden die Parametervariationen dazu genutzt, für jeden Modelllauf die Stabilität des Differentialgleichungssystems zu überprüfen. Diese Tests verliefen durchweg positiv, d.h. bei keiner der vorgenommenen Parametervariationen kam es zu Inkonsistenzen bei den Ergebnissen für die einzelnen Modellvariablen.

Tabelle 29 Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse als Abweichung von den simulierten Standard- N_{\min} -Konzentrationen für den 27. Februar und den 16. August 1989.

| Parameter/ Startwert | Beschreibung | Variation (Standard) | Abweichung N_{\min} (Febr.) [%] | | Abweichung N_{\min} (Aug.) [%] | |
|-------------------------|---|-------------------------|---|-------|--|-------|
| $\mu C_{s_{max}}$ | Mikrob. Wachstumsrate auf C_s [Tag ⁻¹] | 1-10 (2,01) | 4,8* | -7,4 | 2,6 | -8,2 |
| α_{max} | Mikrob. Sterberate [Tag ⁻¹] | 0,18-1,8 (0,36) | -3,6 | 9,9 | -3,2 | -0,8 |
| μNH_4_{max} | Mikrob. Wachstumsrate auf NH_4^+ [Tag ⁻¹] | 0,5-5,3 (1,1) | 0,7 | -4,1 | 5,3 | -7,9 |
| $\eta C_{d_{max}}$ | Abbaurrate für den labilen C-Pool C_d [Tag ⁻¹] | 0,7-7,0 (1,37) | -10,0 | 40,2 | -8,1 | 3,0 |
| $\eta C_{h_{max}}$ | Abbaurrate für den stabilen C-Pool C_h [Tag ⁻¹] | 0,32-3,2 (0,64) | -1,4 | 18,3 | -2,5 | 27,4 |
| $\mu_{n1_{max}}$ | Nitrifikationsrate für NH_4^+ [Tag ⁻¹] | 22-220 (43) | -0,2 | 0,0 | 6,6 | -31,4 |
| μNO_3_{max} | Mikrob. Wachstumsrate auf NO_3^- [Tag ⁻¹] | 0,04-0,4 (0,08) | 1,9 | -14,0 | -0,6 | 2,6 |
| mn_{NO_3} | NO_3^- für Erhaltungsumsatz [kg ha ⁻¹ 10 cm ⁻¹] | 0,1-1,0 (0,22) | 0,5 | -4,6 | -0,1 | -0,8 |
| k_{nitden} | Umsatzrate für NO_2^- (autotrophe Denit.) [Tag ⁻¹] | 0,02-0,2 (0,04) | 0,1 | -3,0 | 0,1 | -3,2 |
| k_c | Sorptionskoeffizient für NH_4^+ [-] | 0,06-0,6 (0,12) | 0,3 | -12,0 | 46,5 | -62,3 |
| C_b/N_b | Mikrob. C/N-Verhältnis [-] | 3,2-8,7 (5,6) | 18,4 | -6,6 | 13,2 | -5,9 |
| $C_d(t_0)$ | Startkonzentration org. Fraktion [% von C_{org}] | 1-10% v. C_{org} (3%) | -10,0 | 17,5 | -4,9 | 6,7 |
| $C_d/N_d(t_0)$ | Start-C/N-Verhältnis labile org. Fraktion [-] | 10-100 (17) | 4,2 | -12,0 | 2,3 | -6,5 |

* Der linke Wert resultiert jeweils aus einem Simulationslauf mit dem niedrigeren Parameter- bzw. Anfangswert, der rechte Wert aus dem höheren Wert.

Wie aus Tabelle 29 zu ersehen ist und wie schon im letzten Kapitel gezeigt wurde, reagiert die N_{\min} -Konzentration sehr sensitiv auf eine Veränderung der Gleichgewichtskonstanten für die NH_4^+ -Sorption k_c . Nach Ausbringung größerer Mengen NH_4^+ -haltigen bzw. bildenden Düngers führt eine Verfünffachung des Wertes zu einer Absenkung der N_{\min} -Konzentration um 62,3 % relativ zum Standardsimulationsergebnis. Auch eine Erhöhung der Abbaukonstanten für die organische Substanz ($\eta C_{d_{max}}$ und $\eta C_{h_{max}}$) führt zu einer merklichen Erhöhung der N_{\min} -Konzentration zu den betrachteten Zeitpunkten. Bei den Anfangswerten sind es das

mikrobielle C/N-Verhältnis und die Anfangskonzentration für die labile organische Substanz (C_d und N_d), die eine größere Veränderung der N_{\min} -Konzentration hervorrufen. Dies sind somit diejenigen sechs Größen, die wenn möglich durch Messungen bestimmt werden sollten.

4.4 Zusammenfassung und Diskussion

Zunächst einmal lässt sich zusammenfassend feststellen, dass auch die in das Ökosystemmodell SIMULAT integrierte Version von SIMULAT-NC für alle Variablen sinnvolle Ergebnisse liefert (siehe Übersicht in Abbildung 35).

Mit Ausnahme des Konzentrationsverlaufes für die labilen und stabilen organischen Pools (C_h und C_d bzw. N_h und N_d) sowie die NO_2^- -Konzentration wurden die Simulationsergebnisse für die einzelnen Variablen bereits im letzten Kapitel besprochen.

Für den Verlauf der organischen Kohlenstoffkonzentration lässt sich feststellen, dass die C-Konzentration gegen Ende der Simulationsperiode auf den Wert zurückkehrt, die sie zu Beginn der Simulation hatte (Abbildung 35f) und dass sich das System in Bezug auf den organischen Kohlenstoff somit im Gleichgewicht befindet. Bei der organischen N-Konzentration ist aufgrund der Zufuhr eines stickstoffreichen organischen Düngers, wie ihn Schweinemist darstellt, gegen Ende der Simulationsperiode eine Erhöhung der organischen N-Konzentration zu verzeichnen (siehe Abbildung 35i).

Wie aus Abbildung 35h zu ersehen ist, führt die Simulation zu einer über weite Zeiträume überhöhten NO_2^- -Konzentration. Dies könnte darauf zurückzuführen sein, dass im Modell die Bildung eines weiteren Intermediärproduktes der Denitrifikation, nämlich Stickstoffoxid (NO) nicht berücksichtigt wird. Dies verbleibt unter anaeroben Bedingungen aufgrund behinderter Diffusion im Boden und wird weiter zu N_2O reduziert. Unter aeroben Bedingungen werden jedoch bei Zufuhr NH_4^+ -haltiger Dünger größere Mengen emittiert (WOLF & RUS-SOW, 2000). Dieser N-Verlust durch die Emission von NO vor allem in den Sommermonaten findet in SIMULAT-NC keine Berücksichtigung und führt zu einer Überschätzung der NO_2^- -Konzentration.

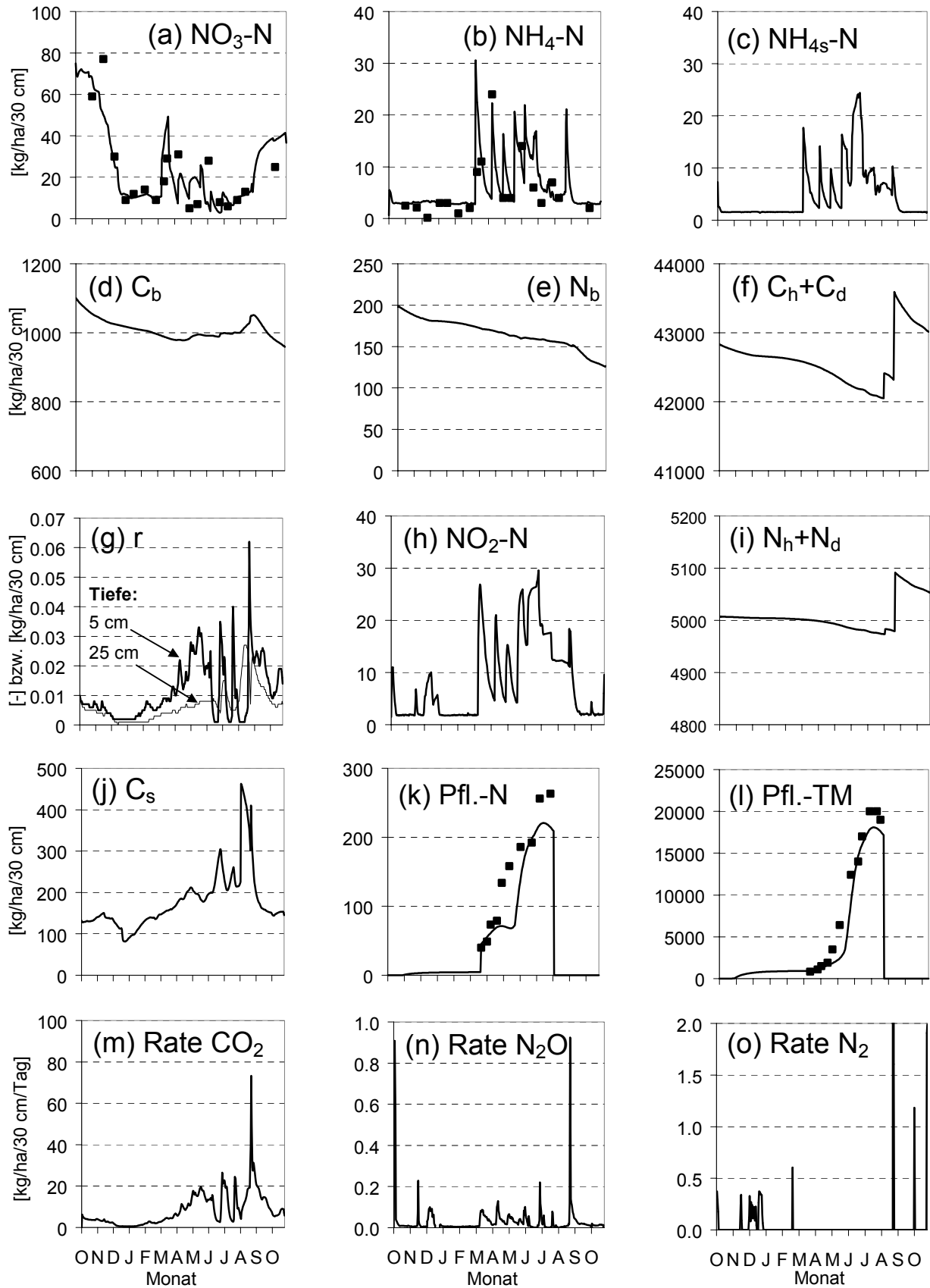


Abbildung 35 Übersicht über den Verlauf aller Modellvariablen von SIMULAT-NC unter Freilandbedingungen.

Bei der Simulation des Pflanzenwachstums führt vor allem die Verschiebung der Phaseneintrittstermine zu einer Unterschätzung der simulierten Pflanzenbiomasse und damit auch des N-Entzugs durch die Pflanze. Obwohl das Modell die gemessenen Werte für die Pflanzenbiomasse kurz vor der Ernte um nur 6,7 % unterschätzt, beläuft sich der Unterschied im Pflanzen-N-Gehalt zu diesem Zeitpunkt auf 47 kg N ha^{-1} . Die maximale N_{\min} -Konzentration in der Bodenschicht 0-90 cm liegt bei 104 kg N ha^{-1} , so dass sich die Abweichung bei der Simulation des pflanzlichen N in der Größenordnung von 50 % der maximalen jährlichen N_{\min} -Konzentration bewegt. Wie schon BERGSTRÖM et al. (1991) anmerken, führen auch hier kleine Fehler bei der Simulation der pflanzlichen Stoffumsätze zu großen Abweichungen zwischen simulierten und gemessenen Werten für den mineralischen Stickstoff im Boden. Hier stellt sich die Frage, ob nicht vor jeder Simulation, bei der die N-Umsätze im Boden im Mittelpunkt des Interesses stehen, eine Neukalibrierung des Pflanzenmodells sinnvoll wäre, um die durch das Pflanzenmodell verursachten Abweichungen zu minimieren.

Die Simulation der N_{\min} -Konzentration zeigt für die Herbst- und Wintermonate sehr gute Ergebnisse. Für die hervorragende Übereinstimmung zwischen Modellergebnis und Messwerten ist vor allem die gute Simulation der NO_3^- -Verlagerung in tiefere Bodenschichten verantwortlich.

Die N_{\min} -Konzentration während der Vegetationsperiode wird, trotz der Abweichungen beim pflanzlichen N-Entzug zufriedenstellend abgebildet. Dies ist vor allen Dingen auf den sehr flexiblen Pool des in der Bodenmatrix sorbierten NH_4^+ (NH_{4s}) zurückzuführen. Ob die simulierten Flüsse des Düngerstickstoffes in die unterschiedlichen Modellkompartimente der Realität entsprechen, lässt sich nicht abschließend beurteilen, da für diesen Zweck Messwerte für alle beteiligten Kompartimente vorliegen müssten. Die Verschlechterung der Simulationsergebnisse bei Nichtberücksichtigung der NH_4^+ -Adsorption und gleichzeitiger Erhöhung der mikrobiellen Immobilisierung liefern aber einen deutlichen Hinweis darauf, dass im vorliegenden Lössboden die Sorption eine wichtigere Rolle spielt als die mikrobielle N-Immobilisierung. Wie sich eher sandige Böden verhalten, müsste untersucht werden.

Die gasförmigen N-Verluste in Form von N_2O und N_2 lassen sich durch SIMULAT-NC in einer plausiblen Größenordnung abbilden. Eine abschließende Beurteilung der Ergebnisse ist allerdings schwierig, da zum Einen die Messwerte fehlen und zum Anderen die in der Literatur berichteten Werte sehr stark variieren. Wie die Ergebnisse der Simulation in Übereinstimmung mit der Literatur zeigen, ist für diesen Modellteil eine Validierung notwendig, da die Denitrifikation, je nach äußeren Bedingungen, einen großen Anteil an den N-Umsätzen haben können. Allerdings sind an die Erhebung der Messwerte einige Ansprüche zu stellen, da N_2O -Flüsse eine hohe räumliche, aber auch zeitliche Variabilität aufweisen. Um N_2O -Emissionen mit Hilfe eines Modells abschätzen zu können, sollte dieses Modell mit Messwerten validiert werden, die einen ganzen Jahreszyklus abdecken und die insbesondere Auftauperioden im Winter berücksichtigen. Diese können nach TEEPE et al. (2000) bis zu 58 % der jährlichen N_2O -Emissionen verursachen. Um alle Emissionsspitzen zu erfassen, sollte die

Häufigkeit der Messungen daher an die Zeitpunkte angepasst werden, die bekanntermaßen für hohe N_2O -Emissionen förderlich sind.

SIMULAT-NC berechnet mit dem Standardparametersatz einen Netto-Rückgang der Konzentration an mikrobiellem Stickstoff N_b . Dieser Verlauf stimmt zwar mit Beobachtungen aus einem Laborversuch von HARDEN (1998) überein, der bei einer Zugabe von Stroh und NH_4^+ zu einem Boden des hier simulierten Untersuchungsstandortes und nachfolgender Inkubation für 300 Tage, ebenfalls einen Rückgang der mikrobiellen N-Konzentration beobachtete. Die Ergebnisse der Freilandmessungen von HARDEN (1998) weisen unter vergleichbarer Bewirtschaftung eine uneinheitliche Tendenz auf, die weder von der verabreichten Düngermenge, noch von der Düngerart signifikant beeinflusst wird. Hier kann es sein, dass die durch Probennahme und Messprozedur verursachten Fehler sich in der gleichen Größenordnung bewegen wie die Konzentrationsänderungen des mikrobiellen Stickstoffes N_b . Je nach Wachstumsstadium kann die mikrobielle Biomassepopulation des Bodens sehr viel stärker in ihrem N-Gehalt variieren als in ihrem C-Gehalt (ANDERSON & DOMSCH, 1980, JENKINSON & LADD, 1981). Bei den Messungen für die mikrobielle N-Konzentration über die Chloroform-Fumigation-Extraktion, wie sie von HARDEN (1998) angewendet wird, wird aber in der Regel mit einem konstanten Proportionalitätsfaktor für das mikrobielle N im zusätzlich extrahierbaren Stickstoff gearbeitet. Für diesen Proportionalitätsfaktor werden aber nach JOERGENSEN (1995) in der Literatur stärker variierende Werte angegeben als für den entsprechende Faktor für den mikrobiellen Kohlenstoff.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die gemessenen Konzentrationen für mineralischen Stickstoff im Boden, auch getrennt als NH_4^+ und NO_3^- durch SIMULAT-NC hervorragend abgebildet werden. Aufgrund fehlender Messwerte für die einzelnen Kompartimente lässt sich nicht abschließend beurteilen, ob die einzelnen Flüsse wirklich den Beitrag zum Zustandekommen der N_{\min} -Konzentrationen leisten, die ihnen über das Modell zugeschrieben werden. Allerdings kann das Modell mit Hilfe einfacher Parametervariationen, wie sie in diesem Kapitel für die NH_4^+ -Sorption und die mikrobielle N-Immobilisierung durchgeführt wurden, wertvolle Hinweise auf die Anteile einzelner Prozesse an den N-Umsätzen liefern.

5. ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

In der vorliegenden Arbeit wird ein Modell für die Simulation des Stickstoff- und Kohlenstoffkreislaufes im Boden mitteleuropäischer Agrarökosysteme vorgestellt. Dieses Modell (SIMULAT-NC) wurde mit dem Ziel entwickelt, die an diesen Kreisläufen beteiligten Prozesse und Dynamiken hinreichend genau abzubilden, das Modell aber gleichzeitig so einfach zu halten, dass es mit einem möglichst geringen Aufwand bei der Beschaffung der Eingabegrößen unter Freilandbedingungen eingesetzt werden kann. Das Resultat ist als ein prozessorientiertes Modell mittlerer Komplexität zu bezeichnen. Die Modellgleichungen für die berücksichtigten Prozesse wurden zuerst mit Hilfe von Labordaten kalibriert und getestet, um abschließend, integriert in das Ökosystemmodell SIMULAT, für die Simulation eines Agrarökosystems unter Freilandbedingungen eingesetzt zu werden.

Von der Annahme ausgehend, dass die mikrobielle Biomasse des Bodens den entscheidenden Antriebsfaktor für die Stoffumsätze im Boden darstellt, werden in SIMULAT-NC zwei Aspekte der mikrobiellen Populationsdynamik in den Vordergrund gestellt. Dies ist zum Einen die Größe der Mikroorganismenpopulation, charakterisiert durch die mikrobielle C- und N-Konzentration sowie ihre Wachstums- und Sterberate. Zum Anderen handelt es sich um die mikrobielle Aktivität r als eine übergeordnete Steuerfunktion, die sowohl auf die mikrobielle Wachstums- und Sterberate als auch auf die Mineralisierungs- und Immobilisierungsraten für alle Stoffkompartimente des Modells einwirkt. Sie wird gesteuert über die Konzentration an mikrobiell direkt verwertbarem Kohlenstoff- und Stickstoffsubstrat sowie die Witterungsbedingungen Temperatur und Bodenwassergehalt. Es wird unterschieden zwischen einer aerob und einer anaerob lebenden Mikroorganismenpopulation, für die jeweils ein eigener Aktivitätsterm (r bzw. r_{den}) formuliert wird. Die Auswirkungen des Konzeptes der mikrobiellen Aktivität auf die Stoffumsätze im Boden weisen zweierlei Ausprägungen auf: Zum Einen kann die Mikroorganismenpopulation des Bodens auch Situationen mit Substratmangel überdauern, indem Teile der Population in einen dormanten Zustand überwechseln und damit die Wachstums-, aber auch die Sterberate der Gesamtpopulation verringern. Zum Anderen weisen die Abbauraten für die organische Substanz im Boden durch die mikrobielle Aktivität ein weites Spektrum von Werten auf, das über die Qualität der organischen Substanz gesteuert wird. Qualität wird hier im Hinblick auf die mikrobielle Verwertbarkeit definiert.

Bei der Simulation von Laborexperimenten konnte gezeigt werden, dass SIMULAT-NC sowohl schnelle als auch langsame Prozesse in unterschiedlichen Böden abbilden kann. Bei der Simulation des Freilandexperimentes wird die mikrobielle Aktivität unter den gegebenen Modellannahmen im Winter und Sommer eher durch die Witterungsbedingungen limitiert, während in den Herbst- und Frühjahrsmonaten eher eine Substratlimitierung (sowohl Kohlenstoff als auch Stickstoff) simuliert wird. Damit reagiert der Aktivitätsterm sehr flexibel auf

eine Vielzahl unterschiedlicher Umweltbedingungen.

Ein Vorteil des Modells besteht darin, dass eine Aufteilung der organischen Substanz des Bodens in nur drei Stoffkompartimente ausreichend ist, um die CO_2 -Emissionen, d.h. die Mineralisierung der organischen Bodensubstanz, aber auch von Ernteresiduen bei der Simulation von Laborexperimenten sehr gut abzubilden.

N_2O -Emissionen resultieren in SIMULAT-NC sowohl aus der Denitrifikation als auch der Nitrifikation. Als Folge treten sowohl bei hohen NO_3^- -Konzentrationen und hohen Wassergehalten des Bodens (d.h. nach Regenereignissen) sowie auch nach der Ausbringung größerer Mengen NH_4^+ -haltigen Düngers Emissionsspitzen auf. Die Funktion für die Temperaturabhängigkeit der Denitrifikation weist, neben einem Maximum bei 30°C ein zweites Maximum bei 6°C auf. So werden auch noch bei Bodentemperaturen nahe 0°C N_2O -Emissionen simuliert, wie es in vielen Feldexperimenten zu beobachten ist. Die Höhe der teilweise in der Literatur berichteten N_2O -Emissionen, das hohe Treibhausgaspotential dieses Gases und die Unsicherheit über die quantitativen Beiträge der einzelnen Faktoren, die zur Freisetzung dieses Gases führen, machen die Modellierung der N_2O -Emissionen zu einem wichtigen Thema.

Für die Simulation der N_{\min} -Konzentrationen unter Laborbedingungen wurde ein Standardsatz von Anfangswerten für die Modellvariablen zusammengestellt, die aus relativ leicht verfügbaren Daten, wie dem organischen C-Gehalt eines Bodens abgeleitet werden können. Mit diesem Standardsatz können die Trends der gemessenen Werte nachvollzogen werden. Erst eine Anpassung der Anfangswerte für die mikrobielle N-Konzentration bzw. das mikrobielle C/N-Verhältnis brachte jedoch ein zufriedenstellendes Simulationsergebnis. Dieses konnte durch Variation der mikrobiellen Immobilisierungsrate für NH_4^+ zu einem sehr guten Simulationsergebnis verbessert werden. Diese Resultate machen deutlich, dass neben den N_{\min} -Konzentrationen zumindest ein abgesicherter Startwert für die mikrobielle N-Konzentration eines Feldes zur Verfügung stehen sollte, um befriedigende Simulationsergebnisse zu erhalten.

Unter Freilandbedingungen werden die NH_4^+ - und die NO_3^- -Konzentrationen vom SIMULAT-Gesamtmodell hervorragend abgebildet. Dies trifft sowohl für die Herbst- und Wintermonate als auch für die Vegetationsperiode zu. Die Gründe für diese gute Übereinstimmung liegen zum Einen darin, dass im Herbst und Winter die NO_3^- -Verlagerung aus der obersten Bodenschicht vom Modell sehr gut simuliert wurde und zum Anderen, dass im Modell über die Sorption von NH_4^+ große N-Mengen schnell und reversibel gebunden wurden. So wurden kurz nach dem Düngetermin bis zu einem Drittel des Düngerstickstoffes in diesem Kompartiment gefunden und danach langsam wieder an die Bodenlösung abgegeben. Damit kann SIMULAT-NC den häufig beobachteten schnellen Konzentrationsrückgang an mineralischem N unmittelbar nach einer Düngerapplikation abbilden. Ob damit die wirkliche Ursache für die geringe N_{\min} -Wiederfindungsrate auf dem untersuchten Schlag getroffen ist, muss allerdings durch gleichzeitige Messung der Konzentration an fixiertem Ammonium und der mikrobiel-

len N-Konzentration als weitere nicht-pflanzliche N_{\min} -Senke überprüft werden. Die Resultate der Simulation geben jedoch einen deutlichen Hinweis in diese Richtung.

Die Einbindung von SIMULAT-NC in das Ökosystemmodell SIMULAT wurde erfolgreich realisiert. Alle Modellvariablen zeigen auch bei Variation ausgewählter Parameter und Anfangswerte einen plausiblen Verlauf. Als Resultat dieser Arbeit steht damit ein kalibriertes und größtenteils validiertes Modellsystem für die Simulation von C- und N-Umsätzen in Agrarböden unter Freilandbedingungen zur Verfügung, dass sich in seiner Komplexität zwischen der der mikrobiellen Wachstumsmodelle und der der vereinfachten Prozessmodelle (siehe Kapitel 1) einordnen lässt. Trotz dieser relativen Einfachheit lassen sich mit dem Modell eine weite Spannbreite unterschiedlich schneller Prozesse abbilden.

6. LITERATUR

- ADDISCOTT T. M. & A. P. WHITMORE (1987): Computer simulation of changes in soil mineral nitrogen and crop nitrogen during autumn, winter and spring.. *J. agric. Sc. Camb.*, **109**, S. 141-157.
- ALBRITTON D. L. & L. G. MEIRA FILFO (2001): Technical Summary of the Working Group I Report of the IPCC, Cambridge University Press, Cambridge.
- ANDERSON T.-H. & K. H. DOMSCH (1989): Ratios of microbial biomass carbon to total organic carbon in arable soils. *Soil Biol. Biochem.*, **21**, S. 471-479.
- ANDERSON T. H. & K. H. DOMSCH (1986): Carbon assimilation and microbial activity in soil. *Z. Pflanzenernähr. Bodenk.*, **149**, S. 457-468.
- ANDERSON J. P. E. & K. H. DOMSCH (1980): Quantities of plant nutrients in the microbial biomass of selected soils. *Soil Science*, **130**, S. 211-216.
- ANONYM (1994): ModelMaker Manual Version 2.0. Cherwell Scientific Publishing, Oxford, Great Britain.
- ARAH J. R. M. (1988): Modelling denitrification in aggregated and structureless soils. In D. S. Jenkinson & K. A. Smith (Hrsg.): Nitrogen efficiency in agricultural soils. *Elsevier Appl. Science*, Barking, S. 433-444.
- AZAM F., F. J. STEVENSON & R. L. MULVANEY (1989): Chemical extraction of newly immobilized ¹⁵N and native soil N as influenced by substrate addition and soil treatments. *Biol. Fert. Soils*, **21**, S. 715-722.
- BECK T. (1979): Die Nitrifikation in Böden. *Z. Pflanzenernähr. Bodenk.*, **142**, S. 344-364.
- BECKER R. (1996): Regional differenzierte Bewertung von Maßnahmen zur Minderung von Stickstoffüberschüssen mittels Stickstoff-Bilanzen. In: Justus-Liebig- Universität Giessen, *Boden und Landschaft - Schriftenreihe zur Bodenkunde*, **11**.
- BENBI D. K. & J. RICHTER (2002): A critical review of some approaches to modelling nitrogen mineralization. *Biol. Fertil. Soils*, **35**, S. 168-183.
- BENDING G. D., M. K. TURNER & I. G. BURNS (1998): Fate of nitrogen from crop residues as affected by biochemical quality and the microbial biomass. *Soil Biol. Biochem.*, **30**, S. 2055-2065.
- BERGSTRÖM L., H. JOHANSSON & G. TORSTENSSON (1991): Simulation of soil nitrogen dynamics using the SOILN model. *Fert. Res.*, **27**, S. 181-188.
- BJARNASON S. (1987): Immobilization and remineralization of ammonium and nitrate after addition of different energy sources to soil. *Plant and Soil*, **97**, S. 381-389.
- BLAGODATSKY S. A., O. HEINEMEYER & J. RICHTER (2000): Estimating the active and total soil microbial biomass by kinetic respiration analysis. *Biol. Fertil. Soils*, **32**, S. 73-81.

- BLAGODATSKY S. A., I. V. YEVDOKIMOV, A. A. LARIONOVA & J. RICHTER (1998): Microbial growth in soil and nitrogen turnover: Model calibration with laboratory data. *Soil Biol. Biochem.*, **30**, S. 1757-1764.
- BLAGODATSKY S. A. & I. V. YEVDOKIMOV (1998): Extractability of microbial N as influenced by C:N ratio in the flush after drying or fumigation.. *Biol. Fertil. Soils*, **28**, S. 5-11.
- BLIEFERT C. (1994): Umweltchemie., VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim.
- BREMNER J. M. (1997): Sources of nitrous oxide in soils. *Nutrient Cycling in Agroecosystems*, **49**, S. 7-16.
- BURNS L. C., R. J. STEVENS & R. J. LAUGHLIN (1996): Production of nitrite in soil by simultaneous nitrification and denitrification. *Soil Biol. Biochem.*, **28**, S. 609-616.
- CHENG W., Q. ZHANG, D. C. COLEMAN, C. R. CARROLL & C. A. HOFFMAN (1996): Is available carbon limiting microbial respiration in the rhizosphere? *Soil Biol. Biochem.*, **28**, S. 1283-1288.
- CHENG W. & D. C. COLEMAN (1990): Effect of living roots on soil organic matter decomposition. *Soil Biol. Biochem.*, **22**, S. 781-787.
- CHRISTENSEN S., S. SIMKINS & J. M. TIEDJE (1990): Spatial variation in denitrification: dependency of activity centers on the soil environment. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **54**, S. 1608-1613.
- CLAYTON H., I. P. MCTAGGART, J. PARKET, L. SWAN & K. A. SMITH (1997): Nitrous oxide emission from fertilized grassland: a two year study of the effect of N fertiliser form and environmental conditions. *Biol. Fertil. Soils*, **25**, S. 252-260.
- CORBEELS M., G. HOFMAN & O. VAN CLEEMPOT (1999): Simulation of net N immobilization and mineralisation in substrate-amended soils by the NCSOIL computer model. *Biol. Fertil. Soils*, **28**, S. 422-430.
- DARRAH P. R. (1991): Models of the rhizosphere. II. A quasi three dimensional simulation of the microbial population dynamics around a growing root releasing soluble exudates. *Plant and Soil*, **138**, S. 147-158.
- DAVIDSON E. A., M. KELLER, H. E. ERICKSON, L. V. VERCHOT, E. VELDKAMP (2000): Testing a Conceptual Model of Soil Emissions of Nitrous and Nitric Oxides. *BioScience*, **50**, S. 667-680.
- DENDOOVEN L., E. MURPHY & D. S. POWLSON (2000): Failure to simulate C and N mineralization in soil using biomass C-to-N ratios as measured by the fumigation extraction method? *Soil Biol. Biochem.*, **32**, S. 659-668.
- DEVEVRE O. C. & W. R. HORWATH (2000): Decomposition of rice straw and microbial carbon use efficiency under different soil temperatures and moistures. *Soil Biol. Biochem.*, **32**, S. 1773-1785.
- DE WILLIGEN P. (1991): Nitrogen turnover in the soil crop system; comparisons of fourteen simulation models.. *Fertiliser Research*, **27**, S. 141-149.
- DIEKKRÜGER B. (1996): SIMULAT - Ein Modellsystem zur Berechnung der Wasser- und Stoffdynamik landwirtschaftlich genutzter Standorte., in RICHTER, O., D. Söndgerath & B. DIEKKRÜGER (Hrsg.): Sonderforschungsbereich 179 "Wasser- und Stoff-

- dynamik in Agrarökosystemen" - Abschlussbericht. *Landschaftsökologie und Umweltforschung*, Bd. 24, Selbstverlag, TU Braunschweig, S. 30-47.
- DIEKKRÜGER B. & M. ARNING (1995): Simulation of water fluxes using different methods for estimating soil parameters. *Ecological Modelling*, **81**, S. 83-95.
- ERNST M. (1996): Persönliche Mitteilung.
- FAO (2003): www.fao.org, FAOSTAT.
- FEIGENBAUM S., A. HADAS, M. SOFER & J. A. E. MOLINA (1994): Clay-fixed ammonium as a source of available nitrogen. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **58**, S. 980-985.
- FEY A., BENCKISER G. & J. C. G. OTTOW (1999): Emissions of nitrous oxide from a constructed wetland using a groundfilter and macrophytes in waste-water purification of a dairy farm. *Biol. Fertil. Soils*, **29**, S. 354-359.
- FIRESTONE M. K. & E. A. DAVIDSON (1989): Microbiological basis of NO and N₂O production and consumption in soil. In M. O. ANDERSON & D. S. SCHIMMEL (Hrsg.): Exchange of Trace Gases between Terrestrial Ecosystems and the Atmosphere. Dahlem Workshop Report 47, John Wiley, New York, S. 7-21.
- FLESSA H., P. DÖRSCH & F. BEESE (1995): Seasonal variation of N₂O and CH₄ fluxes in differently managed arable soils in southern Germany. *J. Geophys. Res.*, **100**, S. 23115-23124.
- FOCHT D. D. & W. VERSTRAETE (1977): Biochemical ecology of nitrification and denitrification. In M. Alexander (Hrsg.): *Advances in microbial ecology*, Plenum Press, New York, S. 135-214.
- FOOKEN U. (1999): Huminsäuren in Oberflächensedimenten der Nordsee - Indikatoren für terrestrischen Eintrag? Dissertation Universität Oldenburg.
- FRANKO U. (1990): C- und N-Dynamik beim Umsatz organischer Substanzen im Boden. In: Akad. Landwirtsch. Wiss. (Hrsg): Kohlenstoff- und Stickstoffdynamik im Boden, sowie Programme zur Steuerung der organischen Düngung (Tagungsbericht), Bd. 295, Berlin, S. 13-26.
- FRIEDEL J. K., J. C. MUNCH & W. R. FISCHER (1996): Soil microbial properties and the assessment of available soil organic matter in a haplic luvisol after several years of different cultivation and crop rotation. *Soil Biol. Biochem.*, **28**, S. 479-488.
- FROLKING S. E., A. R. MOSIER, D. S. OJIMA, C. LI, W. J. PARTON, C. S. POTTER, E. PRIESACK, R. STENGER, C. HABERBOSCH, P. DÖRSCH, H. FLESSA & K. A. SMITH (1998): Comparison of N₂O emissions from soils at three temperate agricultural sites: simulations of year-round measurements by four models. *Nutrient Cycling in Agroecosystems*, **52**, S. 77-105.
- GISI U. (1990): Bodenökologie., Georg Thieme Verlag, Stuttgart, S. 304.
- GRANT R. F. (1994): Simulation of ecological controls on nitrification. *Soil Biol. Biochem.*, **26**, S. 305-315.
- GRANT R. F. & P. ROCHETTE (1994): Soil microbial respiration at different water potentials and temperatures: Theory and mathematical modeling. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **58**, S. 1681-1690.

- GREGORICH E. G., B. C. LIANG, C. F. DRURY, A. F. MACKENZIE & W. B. MCGILL (2000): Elucidation of the source and turnover of water soluble and microbial biomass in agricultural soils. *Soil Biol. Biochem.*, **32**, S. 581-587.
- GRUNDMANN G. L. & D. E. ROLSTON (1987): A water function approximation to degree of anaerobiosis associated with denitrification. *Soil Science*, **144**, S. 437-441.
- HAAS E., R. NIEDER & J. RICHTER (1993): Temporal variability of non-exchangeable ammonium in a loess-derived Luvisol. *Modeling Geo-Biosphere Processes*, **2**, S. 163-171.
- HADAS A. & R. PORTNOY (1994): Nitrogen and carbon mineralization rates of composted manures incubated in soil. *Journal of Environmental Quality*, **23**, S. 1184-1189.
- HAIDER K. & J. P. MARTIN (1979): Abbau und Umwandlung von Pflanzenrückständen und ihren Inhaltsstoffen durch die Mikroflora des Bodens. *Z. Pflanzenernähr. Bodenkd.*, **142**, S. 456-475.
- HARDEN T. (1998): Erfassung und Modellierung mikrobieller C- und N-Umsetzungsprozesse in südostniedersächsischen Löß-Ackerböden. Dissertation, TU Braunschweig.
- HENRIKSEN T. M., & T. A. BRELAND (1999): Nitrogen availability effects on carbon mineralization, fungal and bacterial growth, and enzyme activities during decomposition of wheat straw in soil. *Soil Biol. Biochem.*, **31**, S. 1121-1134.
- JACINTHE P. A., W. A. DICK & L. B. OWENS (2002): Overwinter soil denitrification activity and mineral nitrogen pools as affected by management practices. *Biol. Fertil. Soils*, **36**, S. 1-9.
- JANSSEN P. H. M. & P. S. C. HEUBERGER (1995): Calibration of process-oriented models. *Ecological Modelling*, **83**, S. 55-66.
- JENKINSON D. S. & J. N. LADD (1981): Microbial biomass in soil: Measurement and turnover., in: *Soil Biochemistry*, Bd. 5, Marcel Dekker, S. 415-471.
- JENKINSON D. S. (1976): The effects of biocidal treatments on metabolism in soil. IV. The decomposition of fumigated organisms in soil. *Soil Biol. Biochem.*, **8**, S. 203-208.
- JENSEN B. (1993): Rhizodeposition by ¹⁴CO₂-pulse-labelled spring barley grown in small field plots on sandy loam. *Soil Biol. Biochem.*, **25**, S. 1553-1559.
- JOERGENSEN R. G. (1995): Die quantitative Bestimmung der mikrobiellen Biomasse in Böden mit der Chloroform-Fumigations-Extraktions-Methode. In B. Meyer (Hrsg.) *Göttinger Bodenkundliche Berichte*, Bd. 104, Justus von Liebig Universität, Göttingen
- JOERGENSEN R. G., B. MEYER & T. MUELLER (1994): Time course of the soil microbial biomass under wheat: A one year field study. *Soil Biol. Biochem.*, **26**, S. 987-994.
- JOERGENSEN R. G., H. KÜBLER, B. MEYER & V. WOLTERS (1993): Die Beziehungen von mikrobiell gebundenem C, N und P in Acker- und Graslandböden. *VDLUFA-Schriftenreihe*, **37**, S. 189-192.
- JOERGENSEN R. G., B. MEYER & T. MÜLLER (1992): Zeitliche Veränderung der mikrobiellen Biomasse in der Ackerkrume einer mitteleuropäischen Lössparabraunerde. *Göttinger Bodenkundliche Berichte*, **100**, S. 1-137.

- JOERGENSEN R. G., P. C. BROOKES & D. S. JENKINSON (1990): Survival of the soil microbial biomass at elevated temperatures. *Soil Biol. Biochem.*, **22**, S. 1129-1136.
- JOERGENSEN R. G. & P. C. BROOKES (1990): Ninhydrin-reactive nitrogen measurements of microbial biomass in 0.5 K₂SO₄ soil extracts. *Soil Biol. Biochem.*, **22**, S. 1023-1027.
- KAISER J. (2001): The Other Global Pollutant: Nitrogen Proves Tough to Curb. *Science*, **294**, S. 1268-1269.
- KALK W. D., W. PRYSTAV, K. J. HÜLSBERGEN & S. BIERMANN (2000): Nährstoffbilanzen in brandenburgischen Landwirtschaftsbetrieben. *Brandenburgische Umwelt Berichte (BUB)*, **9**, S. 25-32.
- KERSEBAUM K. C. & O. RICHTER (1994): A model approach to simulate C and N transformations through microbial biomass. In HASSINK J. J. & J. NEETESON (Hrsg): Nitrogen mineralization in agricultural soils. Symposium of the former DLO Institute for Soil Fertility Research, Haren, The Netherlands, April 1993, S. 221-230.
- KERSEBAUM K. C. (1989): Die Simulation der Stickstoff-Dynamik von Ackerböden. Dissertation, Universität Hannover.
- KIRSCHBAUM M. U. F. (1995): The temperature dependence of soil organic matter decomposition, and the effect of global warming on soil organic storage. *Soil Biol. Biochem.*, **27**, S. 753-760.
- KLIMANEK E. M. (1991): Umsetzungsverhalten der Wurzeln landwirtschaftlich genutzter Pflanzenarten in Abhängigkeit vom Vegetationsstadium. *Arch. Acker- Pflanzenbau Bodenkd.*, **35**, S. 121-128.
- KNAPP E. B. & L. F. ELLIOTT & G. S. CAMPBELL (1983): Carbon, nitrogen and microbial biomass interrelationships during the decomposition of wheat straw: A mechanistic simulation model. *Soil Biol. Biochem.*, **15**, S. 455-461.
- KNOWLES R. (1981): Denitrification. In E. A. PAUL und J. N. LADD (Hrsg.): *Soil Biochemistry*, Bd. 5, Marcel Dekker, S. 323-369.
- KÖBRICH D. (1995): Die Emission von Distickstoffoxid (N₂O) aus einer ackerbaulich genutzten Fläche. Quantifizierung und Modellierung. Dissertation, TU Braunschweig.
- KOIKE I. & A. HATTORI (1975a): Energy yield of denitrification: An estimate from growth yield in continuous cultures of *Pseudomonas denitrificans* under nitrate-, nitrite- and nitrous oxide-limited conditions. *J. General Microbiol.*, **88**, S. 11-19.
- KOIKE I. & A. HATTORI (1975b): Growth yield of a denitrifying bacterium, *Pseudomonas denitrificans*, under aerobic and denitrifying conditions. *J. General Microbiol.*, **88**, S. 1-10.
- KUZIYAKOV Y., J. K. FRIEDEL & K. STAHR. (2000): Review of mechanisms and quantification of priming effects. *Soil Biol. Biochem.*, **32**, S. 1485-1498.
- LAVAHUN M. F. E., R. G. JOERGENSEN & B. MEYER (1996): Activity and biomass of soil microorganisms at different depths. *Biol. Fertil. Soils*, **23**, S. 38-42.
- LEFFELAAR P. A. & W. W. WESSEL (1988): Denitrification in a homogeneous, closed system: Experiment and simulation. *Soil Science*, **146**, S. 335-349.

- LEIROS M. C., C. TRASAR-CEPEDA, S. SEOANE & F. GIL-SOTRES (1999): Dependence of mineralization of soil organic matter on temperature and moisture. *Soil Biol. Biochem.*, **31**, S. 327-335.
- LEMKE R. L., R.C. IZAURRALDE & M. NYBORG (1998): Seasonal distribution of nitrous oxide emissions from soils in the Parkland Region. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **62**, S. 1320-1326.
- LETTAU T. & Y. Kuzyakov (1999): Verwertung organischer Substanzen durch mikrobielle Bodenbiomasse als eine Funktion chemisch-thermodynamischer Parameter. *J. Plant Nutr. Soil Sci.*, **162**, S. 171-177.
- LINN D. M. & J. W. DORAN (1984): Effect of water-filled pore space on carbon dioxide and nitrous oxide production in tilled and non-tilled soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **48**, S. 1267-1272.
- MAAG M. & F. P. VINTHER (1996): Nitrous oxide emission by nitrification and denitrification in different soil types and at different soil moisture contents and temperatures. *Applied Soil Ecology*, **4**, S. 5-14.
- MAHIMAIRAJA S., N. S. BOLAN & M. J. HEDLEY (1995): Denitrification losses of N from fresh and composted manures. *Soil Biol. Biochem.*, **27**, S. 1223-1225.
- MALHI S. S. & W. B. MCGILL (1982): Nitrification in three Alberta soils: Effect of temperature, moisture and substrate concentration. *Soil Biol. Biochem.*, **14**, S. 393-399.
- MALTHUS T. R. (1798): An Essay on the Principle of Population., Johnson, London.
- MARTIN J. K. & R. MERCKX (1992): The partitioning of photosynthetically fixed carbon within the rhizosphere of mature wheat. *Soil Biol. Biochem.*, **24**, S. 1147-1156.
- MARUMOTO T., J. P. E. ANDERSON & K. H. DOMSCH (1982): Decomposition of ¹⁴C and ¹⁵N-labelled microbial cells in soil. *Soil Biol. Biochem.*, **14**, S. 461-467.
- MCGILL W. B., H. W. HUNT, R. G. WOODMANSEE & J. O. REUSS (1981): Phoenix, a model of the dynamics of carbon and nitrogen in grassland soils. In ROSSWALL, F. E. & T. CLARK (Hrsg.): Terrestrial Nitrogen Cycles. Processes, Ecosystem Strategies and Management Impacts. Ecological Bulletins, Bd. 33, Stockholm, S. 49-115.
- MCVOY C. W., K. C. KERSEBAUM, M. ARNING, P. KLEEGERG, H. OTHMER & U. SCHRÖDER (1995): A data set from north Germany for the validation of agroecosystem models: documentation and evaluation. *Ecological Modelling*, **81**, S. 265-300.
- MERCKX R., A. DIJKSTRA, A. DEN HARTOG & J. A. VAN VEEN (1987): Production of root-derived material and associated microbial growth in soil at different nutrient levels. *Biol. Fertil. Soils*, **5**, S. 126-132.
- MICHAELIS L. & M. MENTEN (1913): Die Kinetik der Invertinwirkung. *Biochem. Zeitschrift*, **49**, S. 333-369.
- MOGGE B., E.-A. KAISER & J.-C. Munch (1999): Nitrous oxide emissions and denitrification N-losses from agricultural soils in the Bornhöved Lake region: influence of organic fertilizers and land-use. *Soil Biol. Biochem.*, **31**, S. 1245-1252.
- MOLINA J. A. E., A. HADAS & C. E. CLAPP (1990): Computer simulation of nitrogen turnover in soil and priming effect. *Soil Biol. Biochem.*, **22**, S. 349-353.

- MONOD J. (1949): The growth of bacterial cultures. *Annual Review of Microbiology*, **3**, S. 371-394.
- MONOD J. (1942): Recherches sur la Croissance des Cultures Bacteriennes. Hermann, Paris.
- MONTENEGRO FERRIGNO H. (1995): Parameterbestimmung und Modellierung der Wasserbewegung in heterogenen Böden. In *Fortschritt-Berichte VDI*, Reihe 15, Nr. 134 VDI Verlag, Düsseldorf, S. 172.
- MOORE J. M., S. KLOSE & M. A. TABATABAI (2000): Soil microbial biomass carbon and nitrogen as affected by cropping systems. *Biol. Fertil. Soils*, **31**, S. 200-210.
- MOSIER A., C. KROEZE, C. NEVISON, O. OENEMA, S. SEITZINGER & O. VAN CLEEMPUT (1998): Closing the global N₂O budget: nitrous oxide emissions through the agricultural nitrogen cycle. *Nutrient Cycling in Agroecosystems*, **52**, S. 225-248.
- NICOLARDOT B. & J. A. E. MOLINA (1994): C and N fluxes between pools of soil organic matter: Model calibration with long-term field experimental data. *Soil Biol. Biochem.*, **26**, S. 245-251.
- NICOLARDOT B., J. A. E. MOLINA & M. R. ALLARD (1994): C and N fluxes between pools of soil organic matter: Model calibration with long-term incubation data. *Soil Biol. Biochem.*, **26**, S. 235-243.
- NIEDER R., E. NEUGEBAUER, A. WILLENBOCKEL, K. C. KERSEBAUM & J. RICHTER (1996): Nitrogen transformation in arable soils of North-West Germany during the cereal growing season. *Biol. Fertil. Soils*, **22**, S. 179-183.
- NIEDER R., A. WILLENBOCKEL, E. NEUGEBAUER, P. WIDMER & J. RICHTER (1995b): Die Rolle der mikrobiellen Biomasse und des mineralisch fixierten Ammoniums bei den Stickstoff-Transformationen in niedersächsischen Löß-Ackerböden unter Winterweizen. II. Umsetzung von ¹⁵N-markiertem Stickstoff. *Z. Pflanzenernähr. Bodenk.*, **158**, S. 477-484.
- NIEDER R., E. NEUGEBAUER, A. WILLENBOCKEL & J. RICHTER (1995a): Die Rolle der mikrobiellen Biomasse und des mineralisch fixierten Ammoniums bei den Stickstoff-Transformationen in niedersächsischen Löß-Ackerböden unter Winter-Weizen. I. Poolgrößenveränderungen. *Z. Pflanzenernähr. Bodenk.*, **158**, S. 469-475.
- NIEDER R., G. SCHOLLMAYER & J. RICHTER (1989): Denitrification in the rooting zone of cropped soils with regard to methodology and climate: A review. *Biol. Fertil. Soils*, **8**, S. 219-226.
- NIESEL-LESSENTHIN B. (1983): Faustzahlen für Landwirtschaft und Gartenbau. 10. Aufl., Landwirtschaftsverlag GmbH, Münster-Hiltrup.
- NIETFELD H., E. PRIESACK & F. BEESE (1992): A Model of solute transport and microbial growth in aggregates. *Modeling of Geo-Biosphere Processes*, **1**, S. 1-12.
- NÖRTERSHEUSER P. (1993): Aufbau von Modellen zur Beschreibung des Verhaltens von Pflanzenschutzmitteln im Boden und Anwendung am Beispiel des Herbizids Quinmerac. In HERRMANN, A. & O. RICHTER (Hrsg.) *Landschaftsökologie und Umweltforschung*, Bd. 20, Selbstverlag, TU Braunschweig.

- NUNAN N., M. A. MORGAN, D. BRENNAN & M. HERLIHY (2001): Organic matter extracted with 0.01 M CaCl₂ or with 0.01 M NaHCO₃ as indices of N mineralisation and microbial biomass. *Biol. Fert. Soils*, **34**, S. 433-440.
- O'CONNELL A. M. (1990): Microbial decomposition (respiration) of litter in eucalypt forests of south-western Australia: an empirical model based on laboratory incubations. *Soil Biol. Biochem.*, **22**, S. 153-160.
- O'NEILL R. V. (1968): Population energetics of a milipede, *Narceus Americanus* (Beavois). *Ecology*, **49**, S. 803-809.
- OTHMER H. & H.-R. BORK (1989): Characterization of the investigation sites. In BORK, H.-R., A. SCHICK & J. DE PLOEY (Hrsg.): *Heinrich Rhodenburg Memorial Symposium, Landschaftsgenese und Landschaftsökologie*, Bd. 16, Selbstverlag, Braunschweig, S. 73-86.
- PANIKOV N. S. (1995): Microbial growth kinetics. Chapman & Hall, London, S. 378.
- PANIKOV N. S. & I. K. KRAVCHENKO (1995): Mathematical simulation of nitrogen fixation in soil under barley. In IMACS/IFAC (Hrsg.): IMACS/IFAC International Symposium on Mathematical Modelling and Simulation in Agriculture & Bio-Industries. IMACS/IFAC, S. III.B.6-1-III.B.6-5.
- PANSU M., Z. SALLIH & P. BOTTNER, P. (1998): Modelling of soil nitrogen forms after organic amendments under controlled conditions. *Soil Biol. Biochem.*, **30**, S. 19-29.
- PARNAS H. (1975): Model for decomposition of organic material by microorganisms. *Soil Biol. Biochem.*, **7**, S. 161-169.
- PARTON (1996): The CENTURY model. In POWLSON, D. S., P. SMITH & J. U. SMITH (Hrsg.): Evaluation of Soil Organic Matter Models Using Existing Long-Term Datasets. NATO ASI Series I, Vol. 38, Springer-Verlag, Heidelberg, S. 283-293.
- PARTON W. J., A. R. MOSIER, D. S. OJIMA, D. W. VALENTINE, D. S. SCHIMEL, K. WEIER, A. E. KULMALA (1996): Generalized model for N₂ and N₂O production from nitrification and denitrification. *Global Biogeochemical Cycles*, **10**, S. 401-412.
- PARTON W. J., J. M. O. SCURLOCK, D. S. OJIMA, T. G. GILMANOV, R. J. SCHOLE, D. S. SCHIMEL, T. KIRCHNER, J.-C. MENAUT, T. SEASTEDT, E. GARCIA MOYA, APINAN KAMNALRUT & J. I. KINY-AMARIO (1993): Observations and modeling of biomass and soil organic matter dynamics for the grassland biome worldwide. *Global Biogeochemical Cycles*, **7**, S. 785-809.
- PAYNE W. J. (1973): Reduction of nitrogenous oxides by microorganisms. *Bacteriological Reviews*, **37**, S. 409-452.
- PIRT S. J. (1965): The maintenance energy of bacteria in growing cultures. *Proc. R. Soc. London*, B163, S. 224-231.
- PRATHER M., D. EHHALT, F. DENTENER, R. DERWENT, E. DLUGKENCKY, E. HOLLAND, I. ISAKSEN, J. KATIMA, V. KIRCHHOFF, P. MATSON, P. MIDGLEY & M. WANG (2001): Atmospheric Chemistry and Greenhouse Gases. In: *Climate Change 2001: The Scientific Basis. Contribution of Working Group I the Third Assessment Report of the IPCC*. Cambridge University Press, Cambridge, S. 241-287.

- PURI G. & M. R. ASHMAN (1999): Microbial immobilization of ^{15}N -labelled ammonium and nitrate in a temperate woodland soil. *Soil Biol. Biochem.*, **31**, S. 929-931.
- RICHTER O. (1985): Simulation des Verhaltens ökologischer Systeme. Mathematische Methoden und Modelle. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, S. 219.
- RICHTER J., A. NUSKE, W. HABENICHT & J. BAUER (1982): Optimized N-mineralization parameters of loess soils from incubation experiments. *Plant and Soil*, **68**, S. 379-388.
- RIJTEMA P. E. & J. G. KROES (1991): Some results of nitrogen simulations with the model ANIMO. *Fert. Res.*, **27**, S. 189-198.
- RODRIGO A., S. RECOUS, C. NEEL & B. MARY (1997): Modelling temperature and moisture effects on C-N transformations in soils: A comparison of nine models. *Ecological Modelling*, **102**, S. 325-339.
- RÖVER M. & E.-A. KAISER (1999): Spatial heterogeneity within the plough layer: Low and moderate variability of soil properties. *Soil Biol. Biochem.*, **31**, S. 175-187.
- RÖVER M., O. HEINEMEYER & E. A. KAISER (1998): Microbial induced nitrous oxide emissions from an arable soil during winter. *Soil Biol. Biochem.*, **30**, S. 1859-1865.
- RYDEN J. C., L. J. LUND & D. D. FOCHT (1979): Direct measurement of denitrification loss from soils: I. Laboratory evaluation of acetylene inhibition of nitrous oxide reduction. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **43**, S. 104-110.
- SCHERER H. W. & W. WERNER (1996): Significance of soil microorganisms for the mobilization of non-exchangeable ammonium. *Biol. Fertil. Soils*, **22**, S. 248-251.
- SCHLEGEL H. G. (1992): Allgemeine Mikrobiologie, Thieme Verlag, Stuttgart.
- SCHNEIDER U. (1991): Messungen von Denitrifikations- und Nitratauswaschungsverlusten in einem landwirtschaftlich genutzten Wassereinzugsgebiet. Dissertation Universität Bonn, Bonn.
- SCHOMBERG H. H., J. L. STEINER & P. W. UNGER (1994): Decomposition and nitrogen dynamics of crop residues: Residue quality and water effect. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **58**, S. 372-381.
- SCHRÖDER U. (1995): Modellierung der Bestandesdynamik von Winterweizen und Zuckerrüben mit einer generischen Modellstruktur., Dissertation, TU Braunschweig.
- SCHRÖDER U., O. RICHTER & K. VELTEN (1995): Performance of the plant growth models of the Special Collaborative Project 179 with respect to winter wheat. *Ecological Modelling*, **81**, S. 243-250.
- SCHRÖDER U. & D. SÖNDGERATH (1995): The concept of biological time for computing the switching points of a growth model for winter wheat. *Ecological Modelling*, **88**, S. 1-8.
- SHI W. & J. M. NORTON (2000): Microbial control of nitrate concentrations in an agricultural soil treated with dairy waste compost or ammonium fertilizer. *Soil Biol. Biochem.*, **32**, S. 1453-1457.
- SKOPP J., M. D. JAWSON & J. W. DORAN (1990): Steady-state aerobic microbial activity as a function of soil water content. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **54**, S. 1619-1625.

- SMITH R. V., R. M. DOYLE, L. C. BURNS & R. J. STEVENS (1997): A model for nitrite accumulation in soils. *Soil Biol. Biochem.*, **29**, S. 1241-1247.
- SMITH S. J., J. F. POWER & W. D. KEMPER (1994): Fixed Ammonium and nitrogen availability. *Soil Science*, **158**, S. 132-140.
- SMITH J. L., B. L. MCNEAL, H. H. CHENG & G. S. CAMPBELL (1986): Calculation of microbial maintenance rates and net nitrogen mineralization in soil at steady-state. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **50**, S. 332-338.
- SMITH O. L. (1982): *Soil microbiology: A model of decomposition and nutrient cycling.*, CRC Press, Boca Raton, S. 1-273.
- SOON Y. K. (1998): Nitrogen cycling involving non-exchangeable ammonium in a gray luvisol. *Biol. Fert. Soils*, **27**, S. 425-429.
- STANFORD G. & S. J. SMITH (1972): Nitrogen mineralization potentials of soils. *Proc. Soil Sci. Soc. Am.*, **36**, S. 465-472.
- STEVENS R. J., R. J. LAUGHLIN, L. C. BURNS, J. R. M. ARAH & R. C. HOOD (1997): Measuring the contributions of nitrification and denitrification to the flux of nitrous oxide from soil. *Soil Biol. Biochem.*, **29**, S. 139-151.
- STOTT D. E., L. F. ELLIOTT, R. I. PAPENDICK, & G. S. CAMPBELL (1986): Low temperature or low water potential effects on the microbial decomposition of wheat residue. *Soil Biol. Biochem.*, **58**, S. 577-582.
- SWINNEN J., J. A. VAN VEEN & R. MERCKX (1995): Carbon fluxes in the rhizosphere of winter wheat and spring barley with conventional vs integrated farming. *Soil Biol. Biochem.*, **27**, S. 811-820.
- TEEPE R., R. BRUMME & F. BEESE (2000): Nitrous oxide emissions from frozen soils under agricultural, fallow, and forest land. *Soil Biol. Biochem.*, **32**, S. 1807-1810.
- VAN CLEEMPUT O. (1998): Subsoils: chemo- and biological denitrification, N₂O and N₂ emissions. *Nutrient Cycling in Agroecosystems*, **52**, S. 187-194.
- VAN VEEN J. A., J. N. LADD & M. AMATO (1985): Turnover of carbon and nitrogen through the microbial biomass in a sandy loam and a clay soil incubated with [¹⁴C]Glucose and [¹⁵N](NH₄)₂SO₄ under different moisture regimes. *Soil Biol. Biochem.*, **17**, S. 747-756.
- VAN VEEN J. A., J. N. LADD & M. J. FRISSEL (1984): Modelling C and N turnover through the microbial biomass in soil. *Plant and Soil*, **76**, S. 257-274.
- VERHULST P. F. (1838): Notice sur la loi que la population suit dans son accroissement. *Corresp. Math. et Phys.*, **10**, S. 113-121.
- VON GÖTZ N. (1997): Regionalisierung des Herbizidabbaus im Boden unter besonderer Berücksichtigung von Bentazon. In HERRMANN, A. & O. RICHTER (Hrsg.) *Landwirtschaftsökologie und Umweltforschung*, Bd. 28, Selbstverlag, TU Braunschweig.
- WHITMORE A. P. (1995): Modelling the mineralization and leaching of nitrogen from crop residues during three successive growing seasons. *Ecological Modelling*, **81**, S. 233-241.

- WHITMORE A. P., K. W. COLEMAN, N. J. BRADBURY & T. M. ADDISCOTT (1991): Simulation of nitrogen in soil and winter wheat crops: modelling nitrogen turnover through organic matter. *Fert. Res.*, **27**, S. 283-291.
- WHITMORE A. P. & L.C. PARRY (1988): Computer simulation of the behaviour of nitrogen in soil and crop in the Broadbalk continuous wheat experiment. In JENKINSON D. S. & K. A. SMITH (Hrsg.): Nitrogen efficiency in agricultural soils. Elsevier, London, S. 418-432.
- WIDMER P. (1993): Zeitliche und räumliche Variabilität der mikrobiellen Biomasse in niedersächsischen Böden., Dissertation, Universität Hannover, Hannover.
- WINOGRADSKY S. N. (1949): Microbiologie du Sol, Masson et Cie (Hrsg.), Paris, S. 861.
- WOLF I. & R. RUSSOW (2000): Different pathways of formation of N₂O, N₂ and NO in black earth soil. *Soil Biol. Biochem.*, **32**, S. 229-239.
- WRAGE N., G. L. VELTHOF, M. L. VAN BEUSICHEM & O. OENEMA (2001): Role of nitrifier denitrification in the production of nitrous oxide. *Soil Biol. Biochem.*, **33**, S. 1723-1732.
- XU J. G. & N. G. JUMA (1994): Relations of shoot C, root C and root length with root released C of two barley cultivars and the decomposition of root-released C in soil. *Canadian J. Soil Sci.*, **74**, S. 17-22.
- YOH M., H. TODA, K. KANDA & H. TSURUTA (1997): Diffusion analysis of N₂O cycling in a fertilized soil. *Nutrient Cycling in Agroecosystems*, **49**, S. 29-33.
- ZIECHMANN W. (1994): Humic Substances, BI-Wissenschaftsverlag, Mannheim.